

1 Diatomiques homonucléaires : F₂ et C₂

1. Expliquer, à l'aide d'un schéma, les notions de recouvrements *axial* et *latéral* entre orbitales atomiques (OA) de type *ns* et *np*. Préciser la symétrie de chaque orbitale moléculaire (OM), ainsi que son caractère *liant* ou *antiliant*.
2. Etablir le diagramme des orbitales moléculaires de la molécule F₂ connaissant l'énergie des orbitales atomiques de F (*cf* annexes).
3. Indiquer la configuration électronique de la molécule F₂ et calculer son indice de liaison.
4. On se propose de construire le diagramme des orbitales moléculaires de la molécule C₂.
 - (a) Comparer l'écart énergétique entre les orbitales atomiques *2s* et *2p* dans les atomes F et C. Quelle en est la conséquence ?
 - (b) En déduire le diagramme des orbitales moléculaires de la molécule C₂ (*cf* annexes).
 - (c) Préciser la configuration électronique de la molécule C₂ et calculer son indice de liaison.
5. Que peut-on dire des propriétés magnétiques de la molécule C₂ ? Sont-elles comparables à celles de O₂ ?
6. Le dioxygène, par absorption d'un photon d'énergie 0,955 eV, voit ses propriétés magnétiques modifiées.
 - (a) Expliquer le phénomène.
 - (b) Calculer la longueur d'onde de la transition d'absorption correspondante. Préciser le domaine spectral.

2 Diatomiques hétéronucléaires : exemple de HCl

1. A partir des données en annexes, identifier les orbitales atomiques que l'on peut combiner entre elles pour construire les orbitales moléculaires de la molécule HCl ?
2. Dans un modèle approché, la fonction d'onde relative aux orbitales moléculaires de HCl peut s'écrire comme la combinaison linéaire $\psi_{\pm} = C_H \phi_{1s}(H) \pm C_{Cl} \phi_{3p_z}(Cl)$
 - (a) Par analogie avec la fonction d'onde de l'ion H₂⁺ (*cf* TE n°9), préciser les orbitales moléculaires respectivement associées aux fonction d'onde ψ_{\pm} .
 - (b) Que représentent les coefficients C_H et C_{Cl} ?
 - (c) Dans le cas d'une fonction ψ_{\pm} normalisée, quelle serait la valeur des coefficients C_H et C_{Cl} si la liaison était :
 - i. purement covalente ?
 - ii. purement ionique ?
 - (d) Calculer le pourcentage de caractère ionique de la liaison H-Cl connaissant sa longueur d_{H-Cl} = 1,27Å et son moment dipolaire μ_D = 1,04D.
3. Construire le diagramme des orbitales moléculaires de la molécule HCl.
4. Etablir la configuration électronique de la molécule HCl et indiquer la valeur de son indice de liaison.

Annexes :

Définition du Debye D : $1 \text{ D} = 3,33 \cdot 10^{-30} \text{ C.m}$

Energie (eV) des orbitales atomiques des différents atomes étudiés :

Atome	1s	2s	2p	3s	3p
H	-13,6	-	-	-	-
C	-309,6	-19,4	-11,1	-	-
O	-562,5	-34,0	-16,8	-	-
F	-717,5	-42,7	-19,9	-	-
Cl	-2852,8	-288,5	-219,6	-29,2	-13,8