

VII – Construction qualitative d'un diagramme orbitalaire par la méthode des fragments : molécules AH_2

Le diagramme orbitalaire d'une molécule peut être déterminé de manière qualitative en utilisant la méthode des fragments. Il s'agit d'établir dans un premier temps une partition de la molécule en deux fragments dont les orbitales sont connues a priori. L'analyse des interactions entre orbitales de fragment de même symétrie (ayant des recouvrements non nuls) permet alors de reconstruire qualitativement la forme des orbitales de la molécule.

A. On considère une molécule AH_2 linéaire (ex : BeH_2)

1) Partition de la molécule

Proposer une partition de la molécule AH_2 en deux fragments possédant les mêmes éléments de symétrie que la molécule complète.

2) Orbitales de fragment

Schématiser qualitativement les orbitales de chacun des fragments.

3) Recouvrements

Recenser les recouvrements non nuls entre orbitales de fragments.

4) Diagramme de corrélation

Construire le diagramme orbitalaire en faisant interagir les orbitales de fragments recouvrantes. Donner la représentation schématique des orbitales moléculaires.

B. On considère une molécule AH_2 coudée (ex : OH_2)

Répondre aux mêmes questions qu'en A. Quelles sont les différences principales entre les diagrammes de corrélation tracés en A et en B ?