

Diagramme Orbitalaire

Biblio : Atkins, Chimie³, Jean&Volatron, Cours M.Vérot, Fosset PC

Théorie des orbitales moléculaires

Approximation : Born-Oppenheimer, Monoélectronique(Slater), Troncature CLOA

Définition : Orbitale liante, Orbitale anti-liante, Plan nodal

Diagrammes de molécules diatomiques

Molécules diatomiques homonucléaires

Méthode de construction 5Cours M.Vérot, Chimie³p149, Fosset PC)

Electrons de valence

Utilisation d'éléments de symétrie de la molécule et de chaque atome → Tableau symétrie Atkins p375, Cours M.Vérot p23, Chimie3p157

Différence d'énergie + critère

Diagramme : recouvrement σ et π

EXPLOITATION DU DIAGRAMME

Règle de remplissage : principe de Aufbau

Indice de liaison

Caractère para/diamagnétique

Comparaison avec Lewis

densité électronique Atkins p371, 372, Chimie3p145

DIAGRAMME CORRELÉ

Evolution : corrélé, non corrélé Cours M.Vérot, Chimie3p165, Fosset PCp493

Molécules diatomiques hétéronucléaires

Polarisation des liaisons

Diagramme HF, Orbimol

Réactivité des molécules.

Diagramme de CO : Orbimol, Fosset PCp499

Calcul des énergies : Cours M.Vérot, Chimie3p151, 171

Diagrammes moléculaires

Méthode des fragments

Choix des fragments Cours M.Vérot, Fosset PC

Décomposition de la molécule en partie plus simple, dont les orbitales sont connues ou facilement calculables

Pas forcément des entités moléculaires réelles

Même règle d'interaction que dans le cas des molécules diatomiques

Construction du diagramme Cours M.Vérot, Jean, Orbimol, Fosset PC Applications

Détermination de la géométrie d'une molécule Diagramme de Walsh :H₂O coudée Volatron p91

Molécules plus complexes Ethylène Volatron p57

Diagramme de Complexe Complexe octaédrique : Fosset PC, Cours M.Vérot, Astruc Orbitales atomiques du métal : allure, énergies

Orbitales des ligands : types de liaison, fragments, Schéma général des perturbations métal-ligand
Conséquence sur les propriétés Ligand pi Modèle de Chatt-Dewar-Ducanson : donation et retrodonation