## **SEANCE 12 (18)**

**Objectifs :** Savoir déterminer les structures spatiales des molécules en utilisant la Méthode de Gillespie et construire des diagrammes énergétiques des orbitales moléculaires et prédire la forme et la possibilité de formation des molécules.

Consignes/Activités d'introduction : lire les notes de cours, déterminer les structures spatiales des molécules, construire un diagramme de niveaux énergétiques des orbitales moléculaires  $\sigma$  et  $\pi$ ; calculer à l'aide du diagramme l'ordre de liaison, estimer la possibilité de formation de la molécule et des propriétés paramagnétiques et diamagnétiques.

## Contenu : Travaux dirigés. Méthode de Gillespie, méthode des orbitales moléculaires

Méthode des orbitales moléculaires : définitions des orbitales  $\sigma$  et  $\pi$  liantes, antiliantes et non liantes, construction des diagrammes des orbitales moléculaires des composés chimiques, détermination de l'ordre de liaison

## Activités : Méthode de Gillespie

- 1. Identifier l'atome central,
- 2. Déterminer les doublets liants et les doublets propres à l'atome central,
- 3. Déterminer le type d'hybridation de l'atome central,
- 4. Déterminer le type de la molécule,
- 5. Déterminer la géométrie de la molécule et faire la représentation,

## Activités : Méthodes des orbitales moléculaires

- 1. Représenter les niveaux énergétiques des orbitales moléculaires,
- 2. Identifier les orbitales moléculaires  $\sigma$  et  $\pi$ ,
- 3. Calculer à l'aide du diagramme l'ordre de liaison.

I. En utilisant la méthode des orbitales atomiques complétez le tableau suivant

Composé	(CO <sub>3</sub> ) <sup>2-</sup>	(BrF <sub>4</sub> ) <sup>-</sup>	XeOCl <sub>2</sub>	(NH <sub>4</sub> ) <sup>+</sup>	O <sub>3</sub>
Type de molécule					
Typé d'hybridation					
Type de géométrie					
Présentation					

Composé	(SO <sub>3</sub> ) <sup>2-</sup>	(SbF <sub>5</sub> ) <sup>-2</sup>	XeO <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	(PF <sub>3</sub> ) <sup>+</sup>	NOBr
Type de molécule					
Typé d'hybridation					
Type de géométrie					
Présentation					

- II. En utilisant la méthode des orbitales moléculaires, construire le diagramme des orbitales, calculez l'ordre de liaison.
  - a. Préciser la configuration des OM de  $O_2^+$ ,  $O_2$ ,  $O_2^-$ ,  $O_2^{2-}$ . On définira pour chacune de ces espèces l'ordre de liaison et on les classera : par distance intermoléculaire décroissante et par énergie de liaison croissante.
  - b. Parmi les espèces suivantes : N<sub>2</sub>, NO, O<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>, F<sub>2</sub>, CN, quelles sont celles qui sont vraisemblablement stabilisées : par addition d'un électron pour former AB<sup>-</sup>, par ionisation en AB<sup>+</sup>?