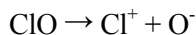


- 5.1 Décrire la différence de densité électronique et d'énergie entre l'orbitale liante et l'orbitale anti-liante qui résulte de la combinaison linéaire de deux orbitales atomiques.
- 5.2 Décrire comment deux orbitales atomiques p se recouvrent pour former soit deux orbitales moléculaires σ , soit deux orbitales moléculaires π .
- 5.3 Comment varie l'énergie et la longueur d'une liaison lorsque l'ordre de liaison augmente ?
- 5.4 Prédire si les espèces diatomiques homonucléaires suivantes sont stables. Pour une série donnée, prédire le classement des espèces par ordre d'énergie de liaison croissante:
a) H_2^+ , H_2^- , H_2^{2-} b) O_2^+ , O_2^- , O_2 .
- 5.5 Écrire la configuration électronique de l'état fondamental et du premier état excité de N_2 . Ces deux états possèdent-ils les mêmes propriétés magnétiques?
- 5.6 Déterminer la configuration électronique et l'ordre de liaison (O.L.) des espèces H_2 , B_2 et F_2 . Lesquelles sont paramagnétiques?
- 5.7 A l'aide d'un diagramme d'énergie des orbitales atomiques et des orbitales moléculaires, prédire laquelle parmi les deux espèces F et F_2 possède la plus grande énergie de première ionisation.
- 5.8 Construire le diagramme d'énergie des orbitales moléculaires de l'ion C_2^{2-} , en y représentant la configuration électronique de l'état fondamental. Calculer l'ordre de liaison. Cette liaison est-elle stable?
- 5.9 Pour chacune des espèces suivantes: O_2 , O_2^+ , O_2^- , O_2^{2-}
a) construire le diagramme d'énergie des orbitales moléculaires;
b) représenter sur le diagramme la configuration électronique de l'état fondamental;
c) prédire les propriétés magnétiques.
Classer les quatre espèces par ordre d'énergie de liaison.
- 5.10 Proposer, en indiquant les hypothèses et les étapes du raisonnement, un diagramme d'énergie des orbitales moléculaires et une configuration électronique de la molécule de phosphore P_2 à l'état fondamental.
- 5.11 a) Porter, sur la même échelle d'énergie, les orbitales atomiques des électrons de valence du lithium Li et de l'hydrogène H .
b) Décrire les orbitales moléculaires que donne, selon vous, la combinaison linéaire de ces orbitales atomiques: quel en est le nombre, quelle symétrie possèdent-elles et quelle est leur énergie, par rapport à celle des orbitales atomiques parentes?
c) Construire le diagramme d'énergie des orbitales moléculaires, en y représentant la configuration électronique de l'état fondamental de la molécule LiH .
d) Cette molécule est-elle stable? pourquoi?
- 5.12 Calculer le changement d'énergie associé à la réaction :



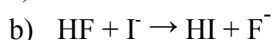
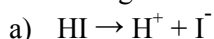
Au besoin, on pourra utiliser le tableau ci-dessous, qui donne l'énergie de première ionisation, I_1 , l'affinité électronique, A_e , et l'énergie de dissociation, ΔE_{diss} , pour quelques atomes et molécules.

	I_1 (eV)	A_e (eV)	$\Delta E_{dissociation}$ (eV)
Cl	12.97	-3.614	
O	13.62	-1.462	
ClO	10.89	-2.276	2.789

5.13 À l'aide du tableau ci-dessous, qui donne l'énergie de première ionisation, I_1 , l'affinité électronique, A_e , et l'énergie de dissociation, ΔE_{diss} , pour quelques atomes et molécules :

	I_1 (eV)	A_e (eV)	$\Delta E_{\text{dissociation}}(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$
H	13.598	-0.7542	
F	17.423	-3.4012	
I	10.451	-3.0590	
HF	16.044	ion instable	569.87
HI	10.386	ion instable	298.41

calculer le changement d'énergie associé à:



5.14 Deux charges de même valeur absolue mais de signe opposé $+\delta$ et $-\delta$, séparées par une distance d donnent naissance à un moment dipolaire. Ce dernier est un vecteur de module $\mu = \delta \times d$ dirigé sur l'axe des deux charges, de $-\delta$ à $+\delta$. Le moment dipolaire de la glycine $^+\text{NH}_3\text{CH}_2\text{COO}^-$ est 16.7 D. Quelle distance sépare les deux atomes chargés de la molécule? Quels sont la direction et le sens du moment dipolaire?

5.15 La distance entre les deux atomes de la molécule de HCl est égale à 1.26 Å. Le moment dipolaire expérimental du gaz est 1.08 D. Calculer le caractère ionique de la liaison. S'agit-il d'une liaison covalente pure, covalente peu polaire, covalente très polaire ou ionique?

5.16 Calculer le caractère ionique de la liaison dans les halogénures métalliques suivants:

	CsF	CsCl	KF	KCl	KBr
$\mu(\text{expérimental})$ (D):	7.9	10.5	7.3	10.4	10.5
longueur de la liaison (Å):	2.34	2.90	2.55	2.67	2.82

5.17 Classer les liaisons suivantes de la moins polaire à la plus polaire : C-N, Li-F, H-H, O-H, C-C, S-O

5.18 Pour une molécule contenant plusieurs liaisons polaires, le moment dipolaire de la molécule est la résultante des vecteurs moments dipolaires de chacune des liaisons. Les deux liaisons H-O de la molécule d'eau font un angle égal à 105° . Sachant que le moment dipolaire expérimental de l'eau est égal à 1.85 D, calculer le moment dipolaire que l'on peut associer à la liaison H-O.

5.19 On considère la molécule de phosgène OCCl_2 , représentée ci-contre, et dont le moment dipolaire est égal à 1.17 D. À l'aide des données de l'aide-mémoire:

a. Calculer l'angle Cl-C-Cl;

b. Comment s'oriente la molécule dans un champ électrique?

