

Contrôle  
Modélisations moléculaires

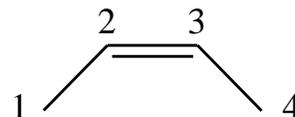
**Exercice I : (7.5 pts)**

Indique la **vrai** ou **faux** et **corrigez la faux**.

- 1- Dans les molécules AH<sub>2</sub> coudées, il y a trois OM liantes et trois OM non liantes.
- 2- Dans la molécule A<sub>2</sub> le système  $\sigma$  résulte d'une interaction à trois OM.
- 3- Une molécule de type AH<sub>2</sub> est toujours coudées.
- 4- Dans les molécules de type AH<sub>2</sub> les OM non liantes sont délocalisées sur trois atomes.
- 5- Les molécules de type AH<sub>2</sub> linéaires un centre d'inversion et six OM de valence.
- 6- Dans la molécule A<sub>2</sub> il y a deux mélanges s/p dans l'orbitale  $\sigma$ .
- 7- Dans la molécule de H<sub>2</sub>O les deux OM qui caractérisent les paires sur l'oxygène sont différentes en formes et en énergie.
- 8- La méthode de Huckel simple proposée pour déterminer les OM d'hydrocarbures conjugués.
- 9- L'Hamiltonien  $\hat{H}$  décrivant deux électrons dans la molécule.
- 10- La méthode de Huckel est une méthode de détermination dans le cadre de la théorie des approximations orbitales.

**Exercice II : (12.5 pts)**

On considère la molécule de **2.3-butadiène** dans sa conformation s-cis :



- 1- Ecrivez le déterminant séculaire de ce système en fonction de  $H_{ii}$ ,  $H_{ij}$ ,  $S_{ii}$ ,  $S_{ij}$  et  $E$ .
- 2- Ecrivez le déterminant séculaire de ce système en fonction de  $\alpha$  et  $\beta$ .
- 3- Ecrivez le déterminant séculaire de ce système en fonction de  $x$ , 1 et 0.
- 4- Déterminez l'équation en fonction  $x$  de 4<sup>eme</sup> ordre.
- 5- Calculez en fonction de  $\alpha$  et  $\beta$  les énergies des différents niveaux moléculaires.
- 6- Tracez le diagramme énergétique et calculez l'énergie totale ( $\pi$ ) du système. Représentez schématiquement différentes orbitales moléculaires.
- 7- Déterminez les expressions des fonctions d'ondes des différentes orbitales moléculaires.
- 8- Calculez les coefficients ( $C_i$ ) des orbitales moléculaires et reportez-les dans un tableau.
- 9- Calculez les différentes charges nettes ( $q_i$ ) et la charge électronique ( $q_r$ ).
- 10- Déterminez les différents indices de liaisons  $\pi$  ( $P_{ij}$ ).

Données :  $x_1 = -1.618$  ,  $x_2 = -0.618$  ,  $x_3 = +0.618$  ,  $x_4 = +1.618$