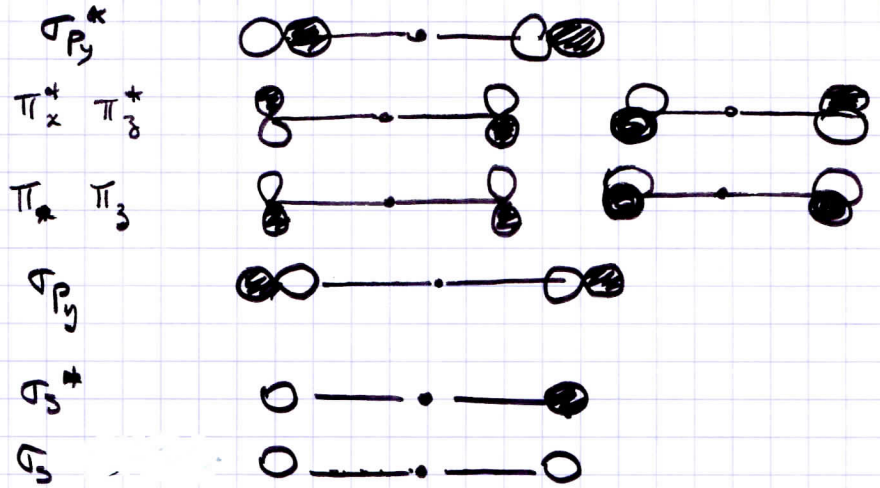
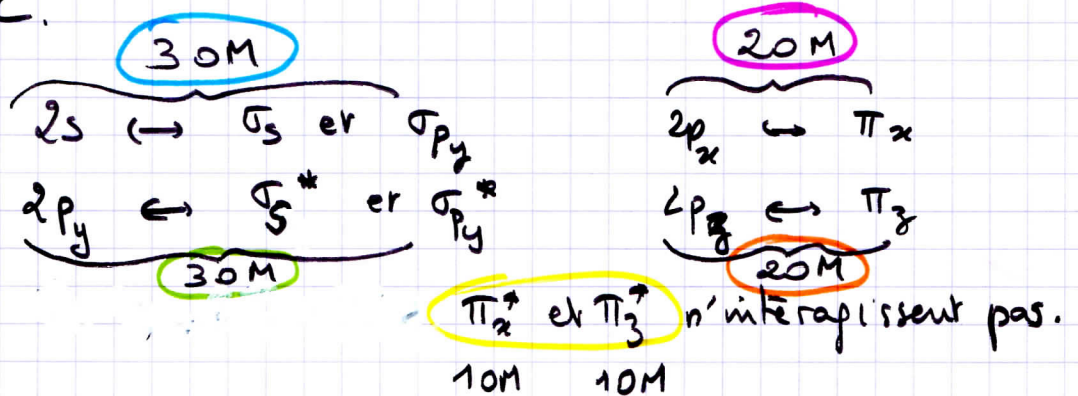


Exercice 4

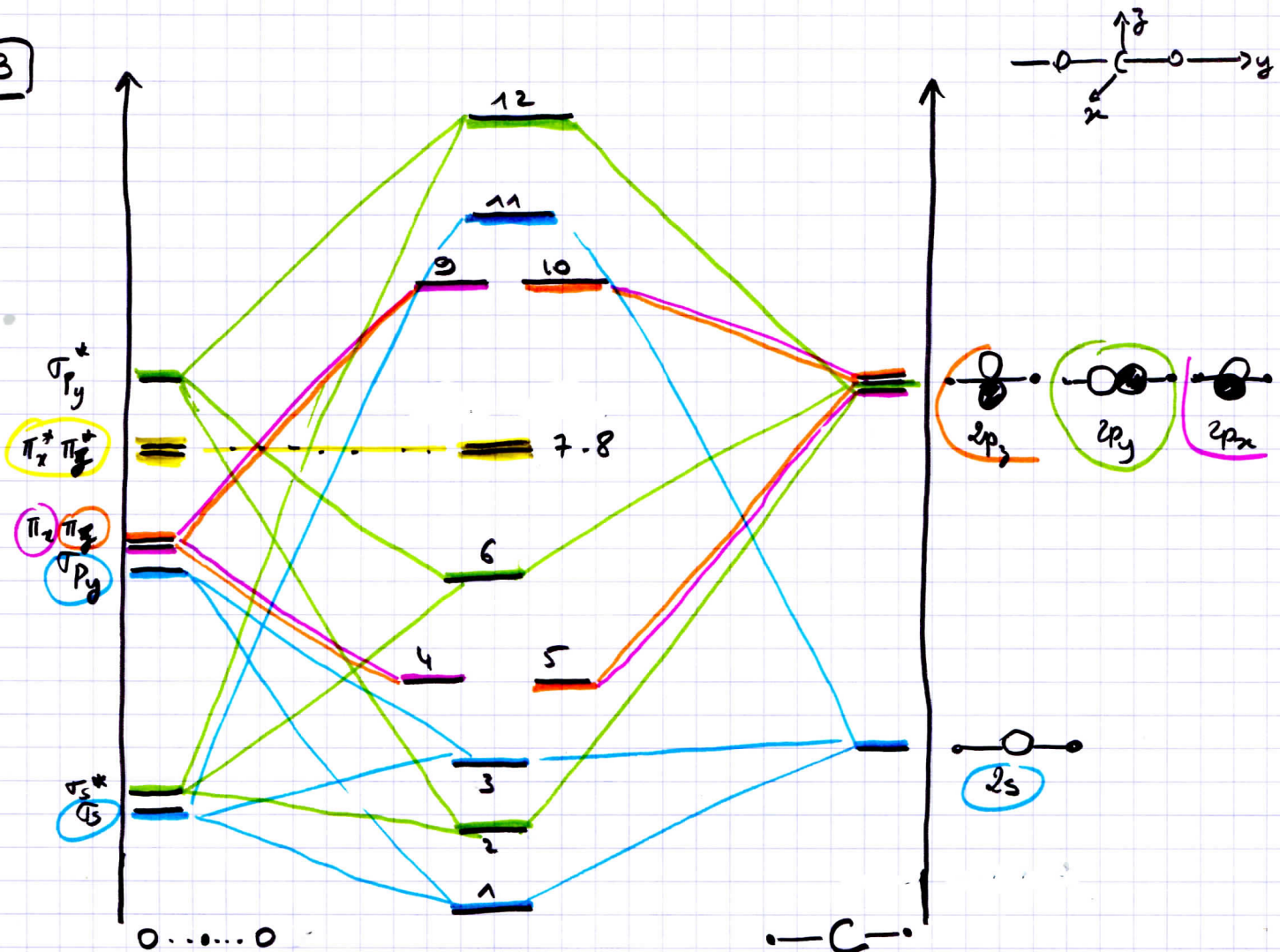
1 Voir cours :



2 Les orbitales de fragment ci-dessus doivent interagir avec les OA de C.



3



OM 1:



aucun plan nodal

OM 2:



σ : 1 plan nodal sur 1 atome

OM 3:



σ : 2 plans nodaux sur 2 atomes

OM 4 - OM 5



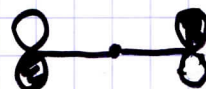
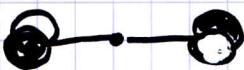
π liant
aucun plan nodal

OM 6:



σ 1 plan nodal sur 1 atome

OM 7 - OM 8



Non liant

OM 9 - OM 10



π^* 2 plans nodaux
ENTRE
les atomes

OM 11



σ^* 2 plans nodaux interatomiques
+ 2 plans nodaux sur 2 atomes

OM 12



σ^* 3 plans nodaux sur 3 atomes
+ 2 plans nodaux interatomiques

Exercice 5

Q2) $\text{HI}^\ominus$ $1s^2$

$\text{Rn} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^7$

$\text{Rn}^\oplus : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^1 4d^7 5p^0$

Q3) $\phi_1 \leftrightarrow d_{3z^2}$



$\phi_2 \leftrightarrow sp_y$



$\phi_3 \leftrightarrow sp_x$

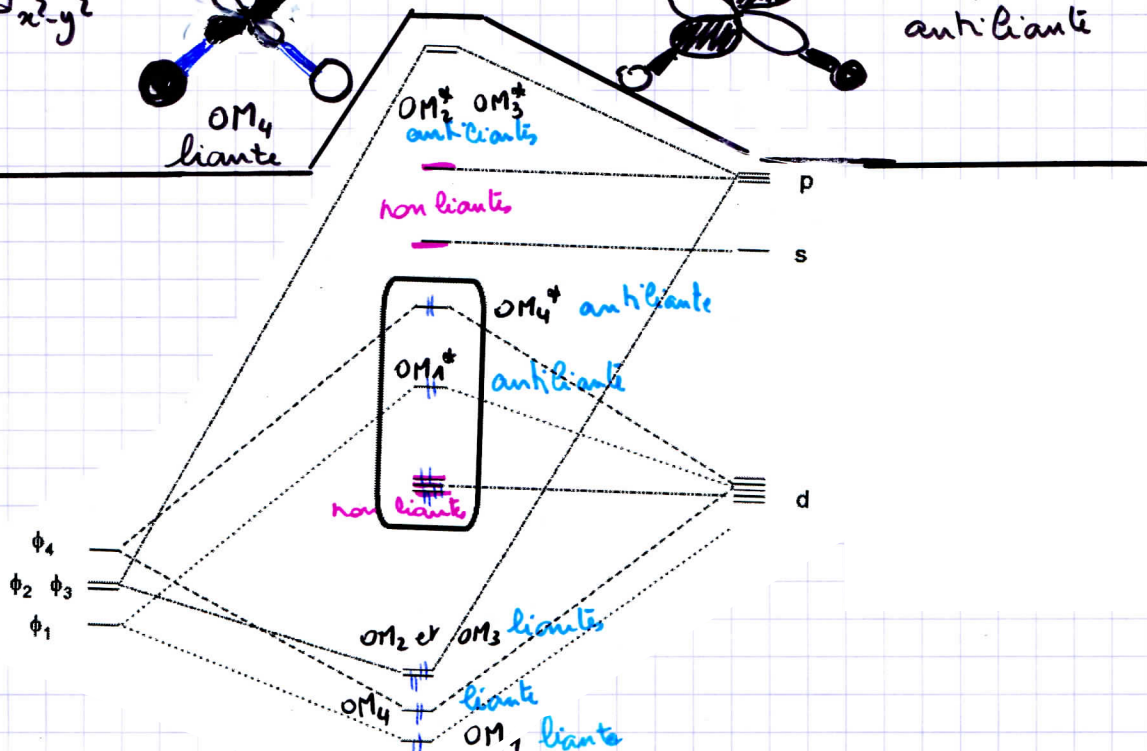


$\phi_4 \leftrightarrow d_{x^2-y^2}$



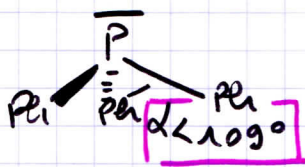
Q4)

E



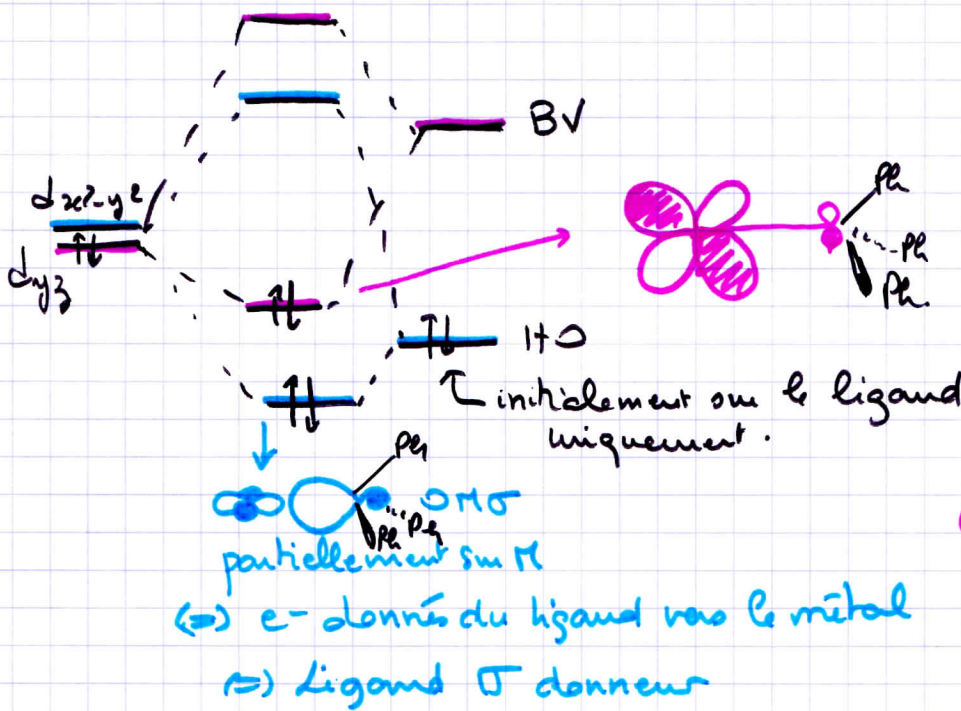
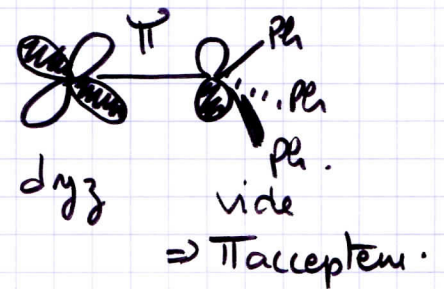
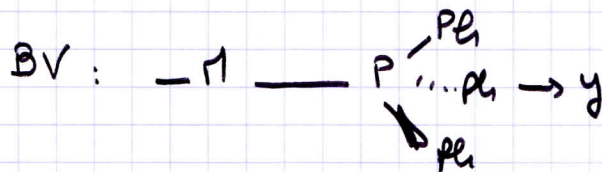
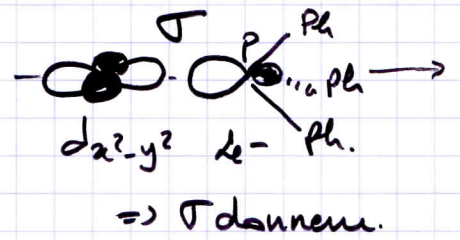
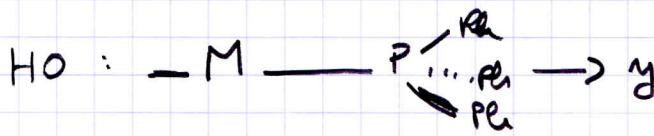
Exercice 6.1

Q6



molécule pyramidale à base triangle.

Q7



ou π partiellement sur le ligand

$\Rightarrow e^-$ donnés du métal vers le ligand initial vide (BV).

$\Rightarrow$ Ligand π accepteur.

Exercice 6-2

[4] $4d^{10}$ ne correspond pas à une configuration classique

5^e période $\uparrow$ 10^e donne

[5] $Z(Pd) = 46 \Rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$ $5s^2 4d^8$
 est devenue $5s^0 4d^{10}$

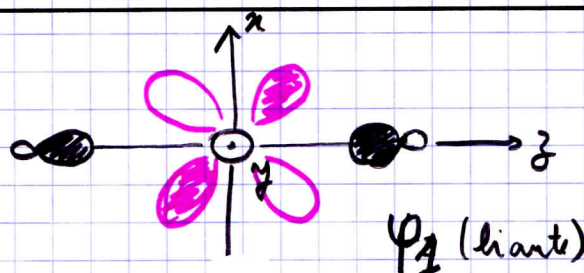
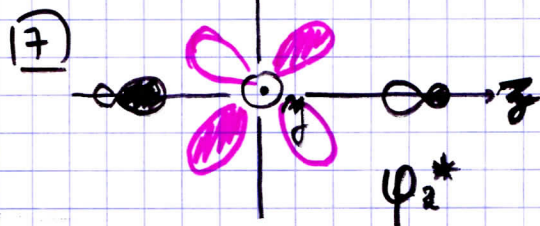
La règle de Klechkowski (remplissage des OA par énergie croissante, ie $(n+l)$ croissant, et à n croissant pour $(n+l)$ identiques).

$5s \Rightarrow n=5, l=0 \quad n+l=5$ devrait être rempli en 1^{er}.

$4d \Rightarrow n=4, l=2 \Rightarrow n+l=6$:

Cause : $4d^{10}$ pleine apporte un surcroît de stabilité.

[6] Voir Q7, ex 6-1!



ψ_1 et ψ_2^* sont symétriques / $(0, y, z)$

alors que d_{xy} est antisymétrique / $(0, y, z)$

} $\Rightarrow$ critère de symétrie NON respecté

[8] Seule l'OA d_{z^2} a la symétrie compatible avec ψ_1

$\psi_1 \rightarrow \text{diagram} \Rightarrow \psi_1 = CL(\psi_1, d_{z^2})$.

Toutes les autres OA d'interagissent pas et restent intactes, non liantes, et à la même énergie que dans l'atome libre.

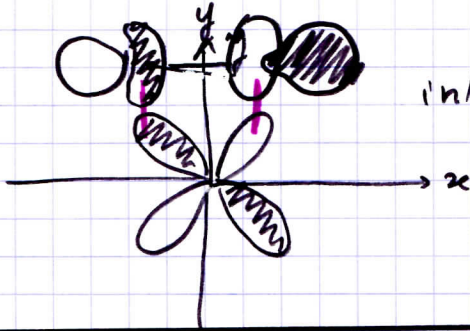
ψ_3 à ψ_6 sont $d_{x^2-y^2}, d_{xz}, d_{yz}, d_{xy}$.

[9] ψ_7 anti-liante, + développée sur Pd.

10 A priori le HO est d'OT susceptible de donner les e^- , soit ψ_7 .

11 ψ_7 est symétrique par rapport au plan (O, y, z)

or le BV du chlorométhane est ANTI symétrique par rapport à ce même plan $\Rightarrow$ pas d'interaction possible.



interaction de type II a priori de qualité.