

5. - Structure de BH₅

Données page suivante

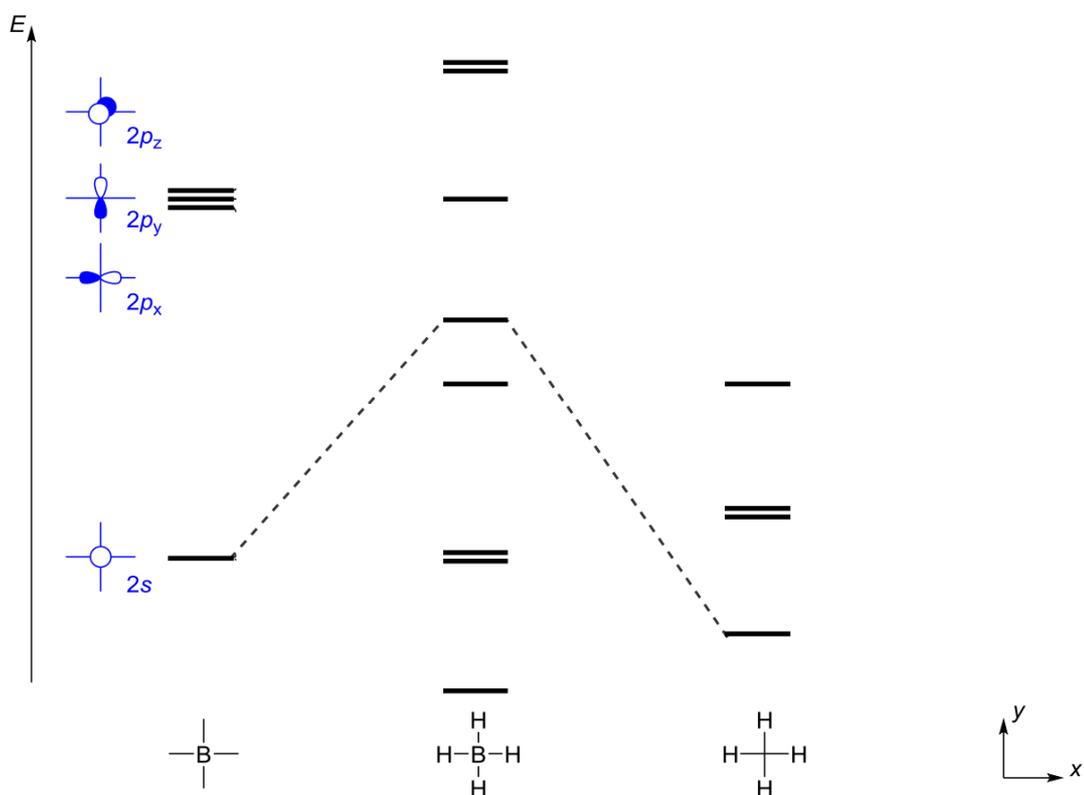
Dans le but de prévoir la structure de l'intermédiaire réactionnel BH₅, apparaissant dans la réaction d'hydrolyse du tétrahydroborate, on envisage la construction, à l'aide de la méthode des fragments, du diagramme d'énergie des orbitales moléculaires (ou OM) de BH₄⁻ dans la géométrie plan-carrée. On suppose que l'atome de bore est à l'origine d'un repère orthonormé et que les 4 atomes d'hydrogène sont positionnés sur les axes Ox et Oy, aux quatre sommets d'un carré. Différentes informations sur des orbitales atomiques (OA) et moléculaires (OM) sont fournies dans les données.

Q38. Représenter, sur un diagramme d'énergie, l'allure conventionnelle des OM du dihydrogène H₂. Préciser la symétrie σ ou π et le caractère liant ou anti-liant de ces OM.

Q39. Montrer que le diagramme d'énergie des OM du fragment H₄ est constitué de 3 niveaux d'énergie, dont l'un est dégénéré. Attribuer, à chacune des OM du fragment H₄ représentées dans les données, un niveau d'énergie.

Q40. Indiquer les interactions possibles entre les OA du bore et les OM du fragment H₄.

Le diagramme qui en résulte est partiellement fourni ci-dessous. Compléter ce diagramme, reproduit sur votre copie, par les liaisons entre les OA du bore, les OM du fragment H₄, et le OM construites. Représenter, sur ce diagramme, les orbitales de fragment de H₄, en vis à vis des niveaux d'énergie représentés, et l'allure conventionnelle des 6 OM de plus faible valeur d'énergie de BH₄⁻ dans la géométrie plan-carrée.



On s'accorde sur le fait que le niveau d'énergie de l'orbitale frontalière HO (Haute Occupée) permet de prévoir la géométrie d'un édifice. Le diagramme d'énergie, présenté **figure 5**, montre l'évolution des énergies des seules OM occupées dans la géométrie plan-carrée précédemment étudiée pour l'un des diagrammes et dans la géométrie tétraédrique que prévoit une étude VSEPR, dans le modèle de Lewis.

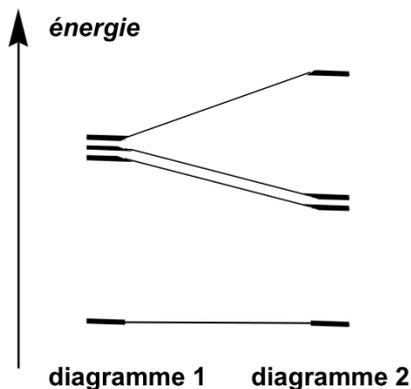


Figure 5

Q41. Attribuer chacun de ces diagrammes d'énergie à une géométrie possible de BH_4^- . Y-a-t-il accord entre le modèle VSEPR et celui des OM ? Justifier.

Données à 298 K

Valeurs d'énergie des orbitales atomiques de valence du bore : $-14,7 \text{ eV}$ et $-5,7 \text{ eV}$

Valeurs d'énergie des orbitales moléculaires du fragment H_4 :

$-16,6 \text{ eV}$, $-13,6 \text{ eV}$ (niveau d'énergie dégénéré) et $-9,6 \text{ eV}$

Allure conventionnelle des orbitales moléculaires du fragment H_4 :

