Système hydrogénocarbonés conjugués.

Une méthode d'étude rapide des électrons π repose sur le modèle de Hückel.

1- On note α l'intégrale coulombienne. Qu'entend-on par intégrale coulombienne ?

2- L'intégrale de résonance est notée β. Que représente β ?

3- L'intégrale coulombienne du fluor est donnée par $\alpha_F = \alpha + 3\,\beta$. Commenter cette valeur.

4- L'équation séculaire s'écrit $\left|H_{i,j} - E \cdot S_{i,j}\right| = 0 = 0$. On pose $x = \dfrac{\alpha - E}{\beta}$.

a- Donner le déterminant séculaire du cation cyclopropénium.

b- Déterminer les valeurs de l'énergie des OM pour ce système.

c- Donner les coefficients des OA et OM pour la HO.

d- Représenter les niveaux d'énergie et placer les électrons dans l'état fondamental.

5- Orbitales frontières : Dans le cas de l'éthylène et du butadiène, représenter sur une échelle d'énergie, les niveaux des OM. Préciser l'origine choisie. Préciser dans chaque cas la HO et la BV.

 © EduKlub S.A.

Tous droits de l'auteur des œuvres réservés. Sauf autorisation, la reproduction ainsi que toute utilisation des œuvres autre que la consultation individuelle et privée sont interdites.

Extrait gratuit de document, le document original comporte 4 pages.