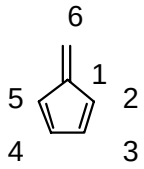
Energie de délocalisation

On donne les énergies des OM et les coefficients des OA dans les OM pour le fulvène, le cyclobutadiène, l'acroléine. Les valeurs des énergies pour :

1- Fulvène :



Energies	1	2	3	4	5	6
$E_1 = \alpha + 2{,}115\ \beta$	0,523	0429	0,385	0,385	0,429	0,247
$E_2 = \alpha + \beta$	- 0,5	0	0,5	0,5	0	- 0,5
$E_3 = \alpha + 0{,}618\ \beta$	0	- 0,601	- 0,372	0,372	0,601	0
$E_4 = \alpha - 0{,}254\ \beta$	- 0,190	- 0,35	0,279	0,279	- 0,350	0,750
$E_5 = \alpha - 1{,}618\ \beta$	0	0,372	- 0,601	0,601	- 0,372	0
$E_6 = \alpha - 1{,}8615\ \beta$	0,663	- 0,439	0,153	0,153	- 0,439	- 0,356

2- Buta-1,3-diène :

Energies	1	2	3	4
$E_1 = \alpha + 1{,}618\ \beta$	0,37	0,6	0,6	0,37
$E_2 = \alpha + 0{,}618\ \beta$	0,60	0,37	- 0,37	- 0,60
$E_3 = \alpha - 0{,}618\ \beta$	0,60	- 0,37	- 0,37	0,60
$E_4 = \alpha - 1{,}618\ \beta$	0,37	- 0,6	0,6	- 0,37

3- Acroléine : CH_2=CH-CHO (atome d'oxygène numéroté 1)

Energies	1	2	3	4
$E_1 = \alpha + 1{,}88\ \beta$	0,67	0,58	0,43	0,23
$E_2 = \alpha + \beta$	0,58	0	- 0,58	- 0,58
$E_3 = \alpha - 0{,}35\ \beta$	0,43	- 0,58	- 0,23	- 0,66

 © 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 5 pages.

$E_4 = \alpha - 1{,}53\ \beta$	0,23	- 0,58	0,66	- 0,43

Les valeurs des énergies pour les molécules de cyclobutadiène, d'hexatriène, d'octatétraène, de cyclooctatétraène, de benzène, d'éthylène et de méthanal sont données :

	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6	E_7	E_8
Cyclobutadiène	$\alpha+2\beta$	α	α	$\alpha-2\beta$				
Hexa-1,3-triène	$\alpha+1{,}8\beta$	$\alpha+1{,}25\beta$	$\alpha+0{,}45\beta$	$\alpha-0{,}45\beta$	$\alpha-1{,}25\beta$	$\alpha-1{,}8\beta$		
Octa-1,3,5,7-tétraène	$\alpha+1{,}88\beta$	$\alpha+1{,}53\beta$	$\alpha+\beta$	$\alpha+0{,}35\beta$	$\alpha-0{,}35\beta$	$\alpha-\beta$	$\alpha-1{,}53\beta$	$\alpha-1{,}88\beta$
Cycloocta-1,3,5,7-tétraène	$\alpha+2\beta$	$\alpha+1{,}41\beta$	$\alpha+1{,}41\beta$	α	α	$\alpha-1{,}41\beta$	$\alpha-1{,}41\beta$	$\alpha-2\beta$
Benzène	$\alpha+2\beta$	$\alpha+\beta$	$\alpha+\beta$	$\alpha-\beta$	$\alpha-\beta$	$\alpha-2\beta$		
Ethylène	$\alpha+\beta$	$\alpha-\beta$						
Méthanal	$\alpha+1{,}62\beta$	$\alpha-0{,}62\beta$						

1- Construire le schéma des orbitales moléculaires HO et BV du fulvène.

2- Pour chaque molécule, calculer l'énergie totale ε_w du système d'électron π dans l'état fondamental en fonction de α et β. Comparer ε_w à l'énergie ε'_w que l'on obtiendrait dans le cas d'un système à liaisons localisées (identiques à plusieurs liaisons de l'éthylène ou du méthanal).

3- Dans toute la suite, on appellera énergie de délocalisation (ou de conjugaison) la différence $\Delta\varepsilon_{déloc} = \varepsilon_w - \varepsilon'_w$. Examiner le signe de $\Delta\varepsilon_{déloc}$ dans les substances proposées. Conclure en ce qui concerne l'effet de conjugaison sur la stabilité d'un système d'électrons.

4- Energie de résonance :

On appelle énergie de résonance la différence $\Delta\varepsilon_{rés} = \varepsilon_w - \varepsilon''_w$ entre l'énergie totale ε_w de ce système dans son état fondamental et l'énergie ε''_w d'un système conjugué linéaire comportant le même nombre de carbones.

Suivant une définition introduite par Hückel, le système cyclique d'énergie ε_w est dit :

- aromatique si $\Delta\varepsilon_{rés} < 0$;
- non aromatique si $\Delta\varepsilon_{rés} = 0$;
- antiaromatique si $\Delta\varepsilon_{rés} > 0$.

© 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 5 pages.