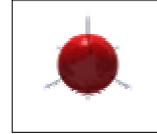


C – L'hybridation des orbitales

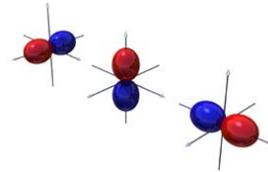


Orbitales atomiques

type s



type p

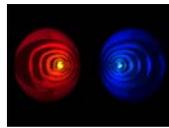
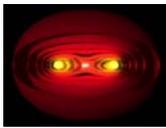


Orbitales moléculaires : combinaison linéaire d'orbitales atomiques « LCAO » $\psi = C_a.\psi_a + C_b.\psi_b$

2 possibilités : 2 Orb. Moléculaires, recouvrement AXIAL

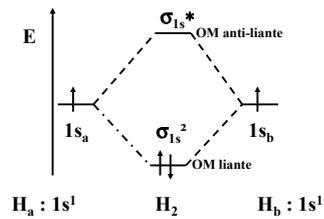
$$\psi(H_2) = 1s^1 + 1s^1$$

$$\psi(H_2)^* = 1s^1 - 1s^1$$



Energie des Orbitales moléculaires

Combinaison d'orbitales « s » => OM « σ »

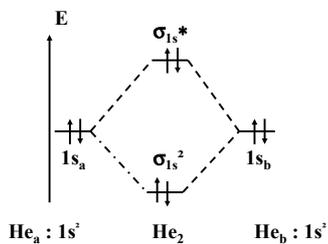


Règle de Pauli et Hund restent vraies :
- 2e- maxi par orbitale
- spin opposés

$$E(H_2) = 2 * E(\sigma_{1s}) < 2 * E(H) = 2 * E(1s)$$

H₂ existe car E plus faible que H + H !

Orbitales Moléculaire de He₂



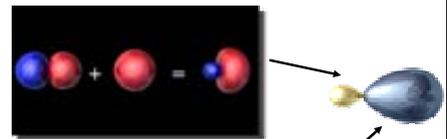
$$E(He_2) = 2 * E(\sigma_{1s}) + 2 * E(\sigma_{1s}^*) > 2 * E(He) = 4 * E(1s)$$

Déstabilisant !!
He₂ n'existe pas!

Orbitales hybrides

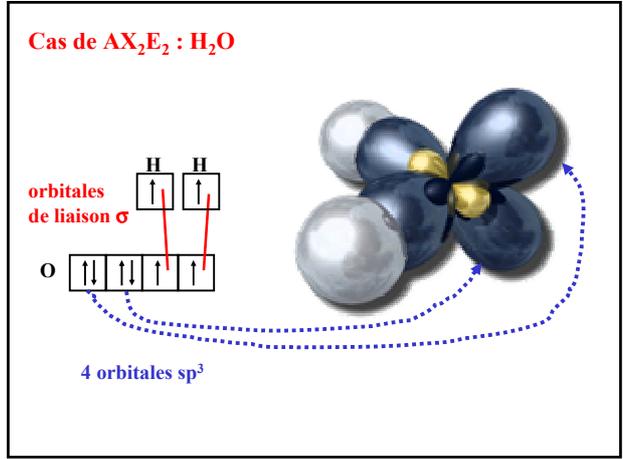
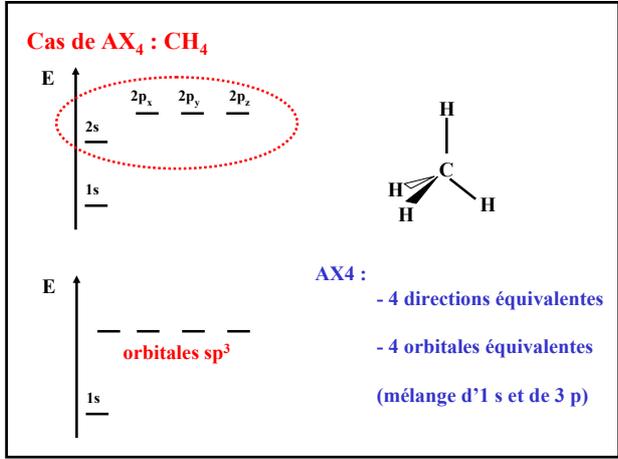
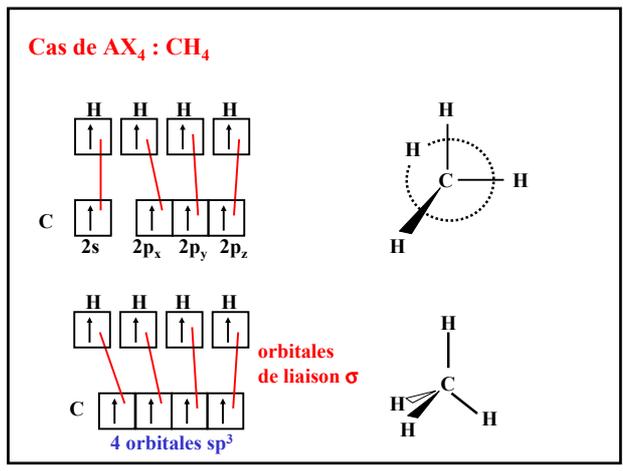
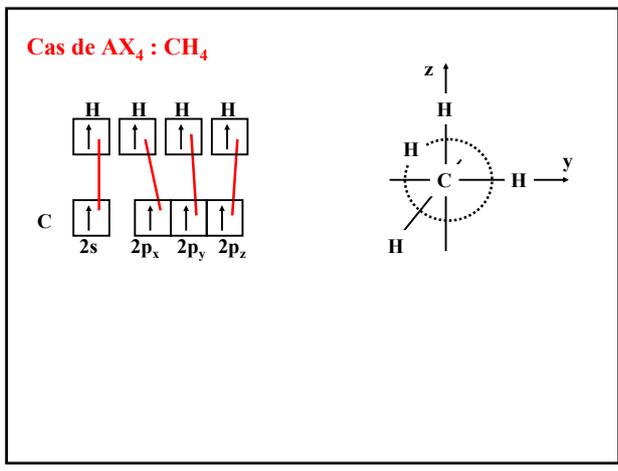
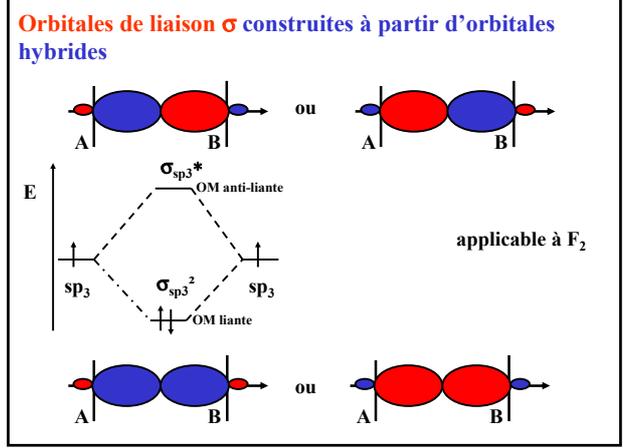
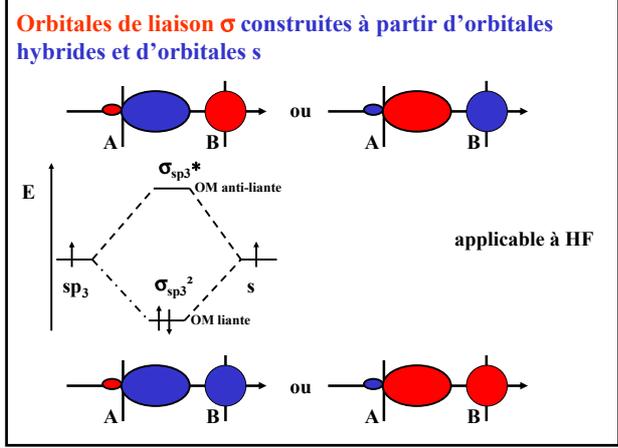
$$\psi = \sum_{p=1}^M C_p \chi_p$$

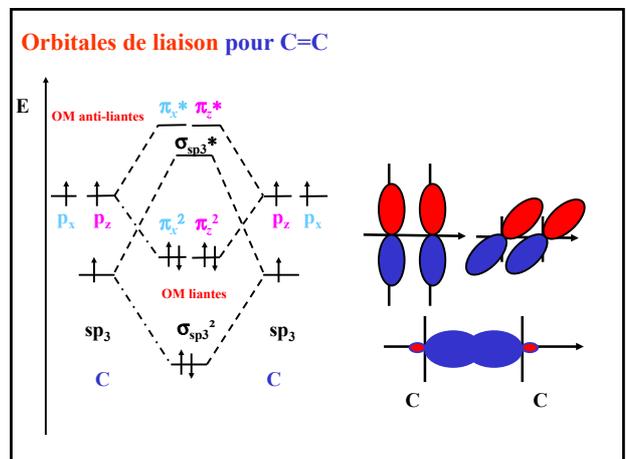
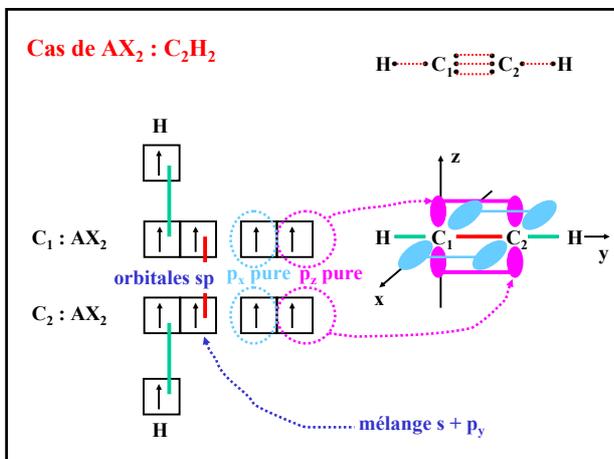
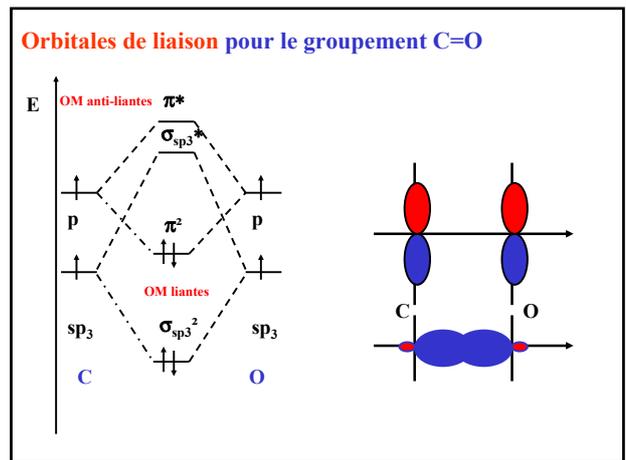
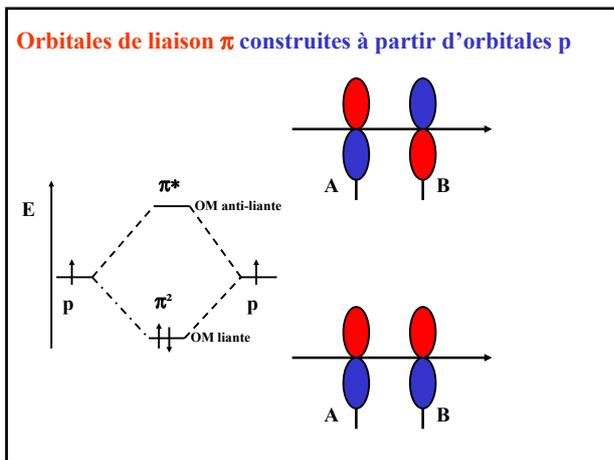
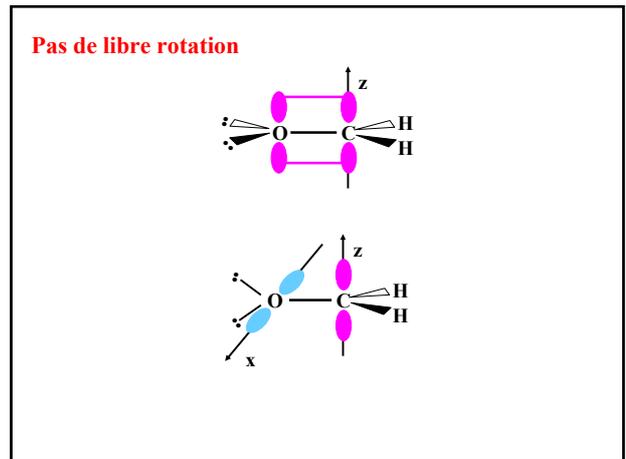
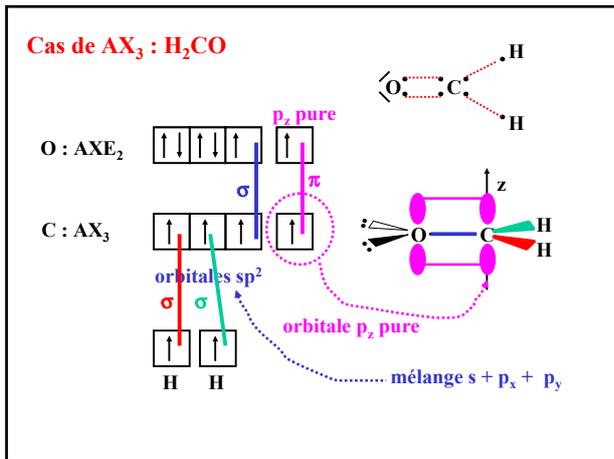
mélange s + p



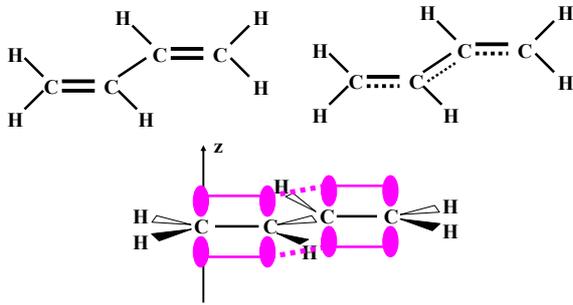
mélange p + p + s





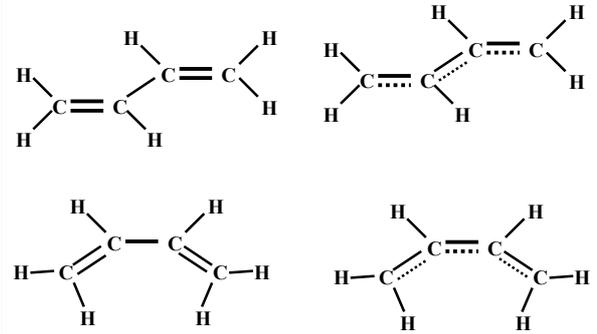


Délocalisation électronique



Quand la délocalisation est possible, les systèmes π sont dits **conjugués**

Délocalisation électronique



Délocalisation électronique

Une molécule sera d'autant plus stable qu'elle présentera une délocalisation π importante.

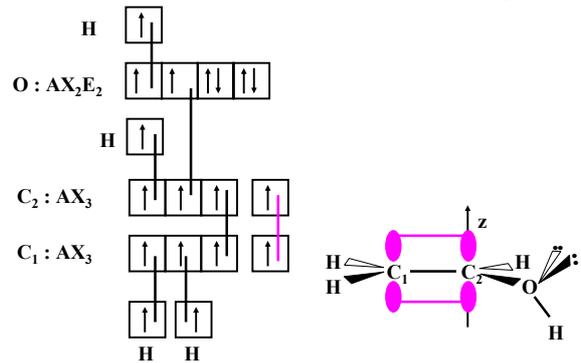
Aromaticité : règle de Hückel

Pour être aromatique, un composé doit obéir aux trois règles suivantes :

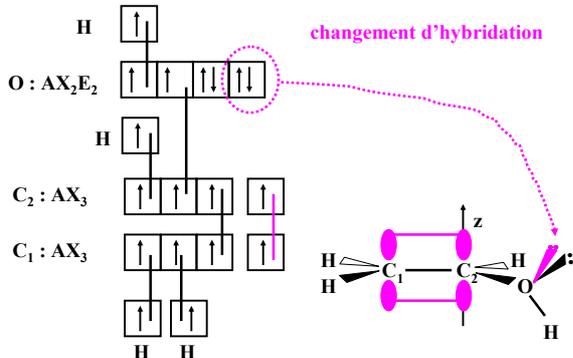
- il est cyclique,
- chaque constituant du cycle participe à la conjugaison (l'hybridation des atomes est de type sp^2 et le cycle est alors plan). Le cycle est entièrement conjugué.
- le nombre d'électrons conjugués répond à la règle de Hückel :

$$\text{Nombre d'électrons conjugués} = 4N + 2 \quad (N = 1, 2, \dots)$$

Délocalisation électronique : cas particulier de $\text{CH}_2\text{-CHOH}$



Délocalisation électronique : cas particulier de $\text{CH}_2\text{-CHOH}$



Délocalisation électronique : cas particulier de $\text{CH}_2\text{-CHOH}$

