

Chapitre

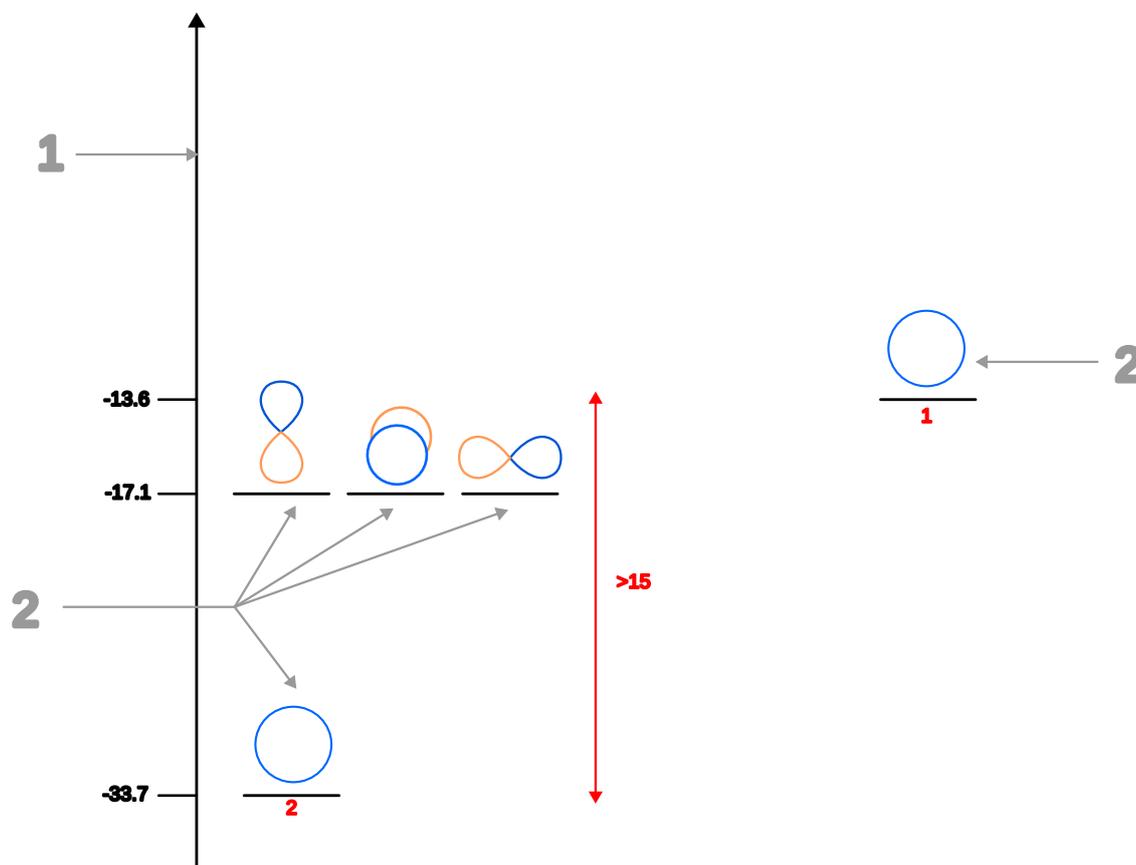
Construire un DOM

5.1 Méthode générale

On se sert dans cette première partie de la molécule OH^- .

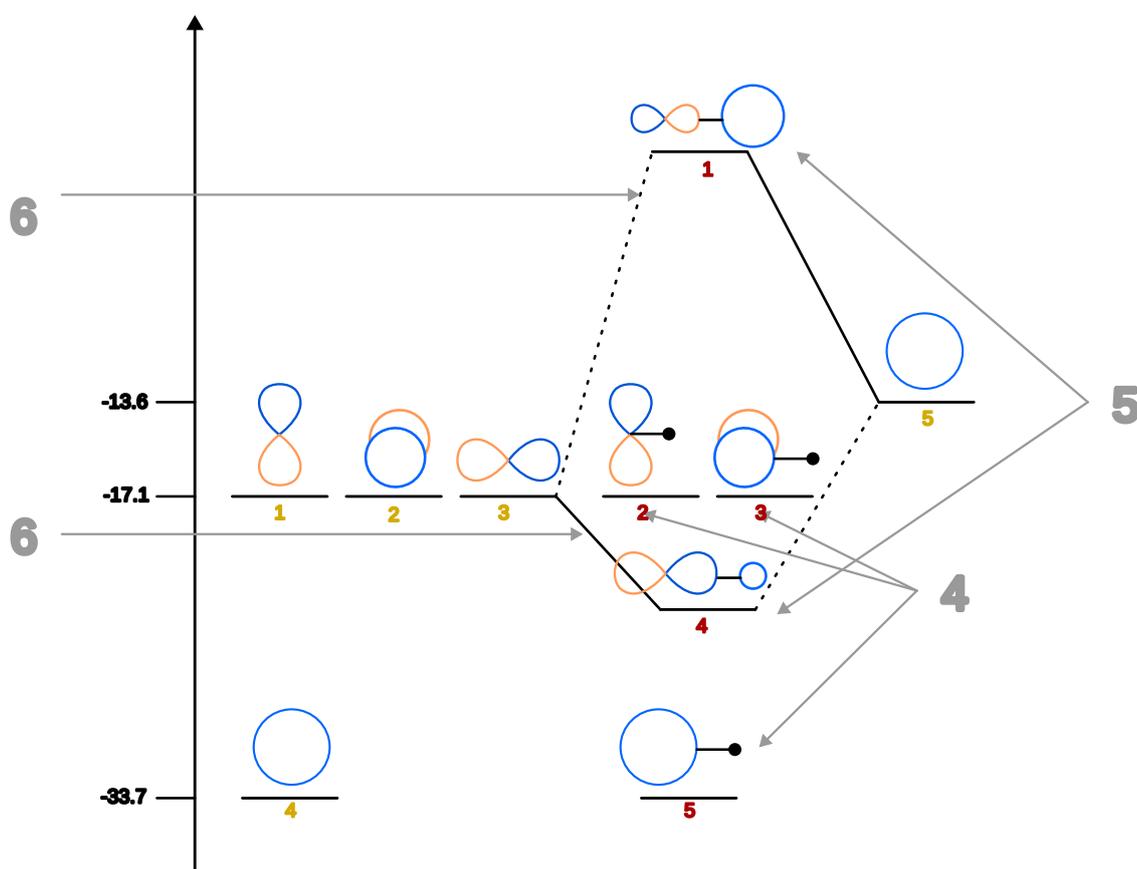
On fait le schéma de Lewis de la molécule et on détermine les OA qui sont impliquées dans la liaison.

1. On trace un trait vertical pour l'échelle d'énergie
2. On place les OA selon leur niveau d'énergie. S'il n'est pas précisé, c'est qu'il est sans importance.

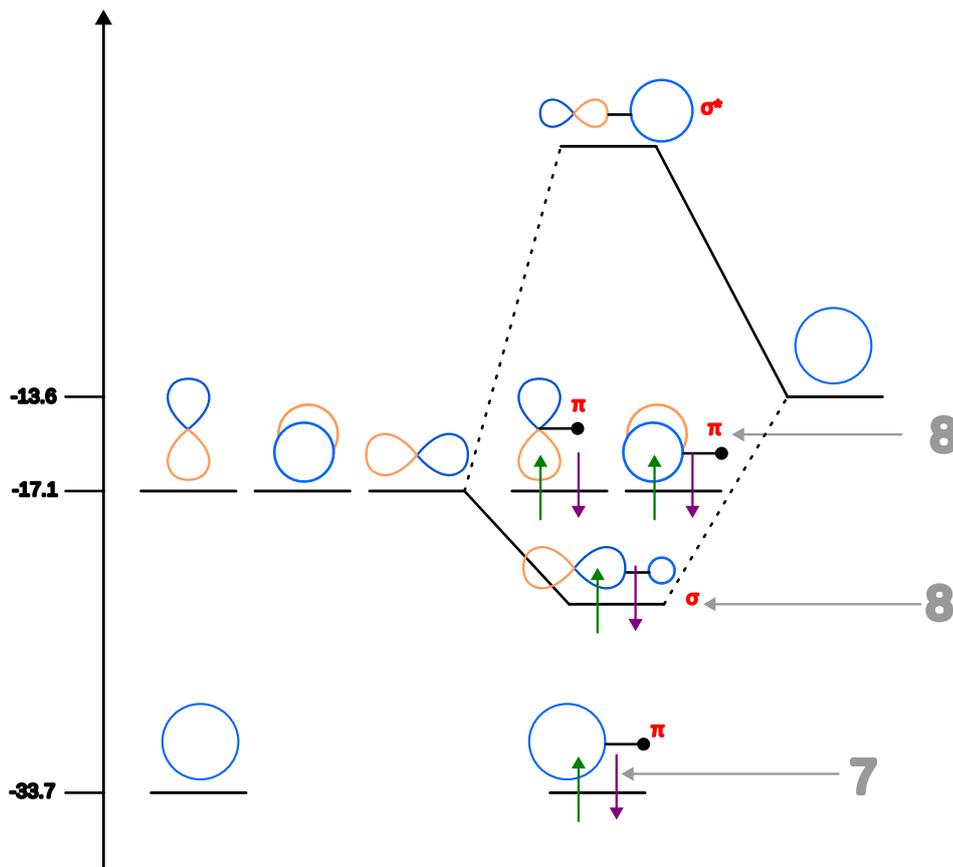


3. On cherche quelle OA interagissent. Si les OA sont séparées de plus de 15 eV, on dit que leurs interactions sont négligeables.
4. Les OA qui ne réagissent pas restent inchangées, on met juste un trait avec un point pour montrer qu'elles appartiennent à la molécule.
5. Pour chaque interaction, on place l'OM liante et l'anti-liante, avec l'anti-liante beaucoup plus haut que la liante est basse. De plus, selon l'énergie des OA formant ces OM, on les dessine avec une taille différente : Plus l'OA est proche du niveau d'énergie de l'OM, plus est dessinée en gros.
6. Si l'OA est petite par rapport à l'autre, on met la liaison en pointillée

À ce stade, il faut qu'il y ait autant d'OA que d'OM, sinon il y a un problème. C'est aussi la fin des étapes obligatoires. La suite est facultative mais peut servir à donner plus d'informations.



7. On peut placer les électrons, en suivant les mêmes règles que pour le placement des électrons dans les OA.
8. On peut donner le type de liaison. Les OM liantes sont notées σ , les anti-liantes σ^* et les non-liantes π



5.2 Cas particuliers

Pour ces deux dernières étapes, on prend la molécule O_2

9. On indique si les liaisons des OM sont π ou σ . On met un numéro pour différencier les systèmes d'OM et indiquer quelle OM liante correspond à quelle OM non Anti-liante.
10. Pour des molécules possédants un centre d'inversion, on indique sur les OM si elles sont symétriques par rapport à leur centre d'inversion ou anti-symétriques (symétriques en changeant de signe). Dans le premier cas, on les annote avec un g et dans le second cas avec un u

On remarque que les OM 1 ont plus d'énergie que l'OM 2 car elles se recouvrent moins que l'OM 2, dont les lobes sont dans le même axe. C'est pourquoi, on les place au-dessus de l'OM 2.

