

E3A PC 2016 corrigé orbitale de NH_4^+

B / DIAGRAMME D'ORBITALES MOLÉCULAIRES DE L'ION AMMONIUM

B1. Symétrie des orbitales

NH_4^+ est un ion tétraédrique dont les atomes N, Hc et Hd sont dans le plan yz et N, Ha et Hb dans le plan xy. Les plans yz et xy sont des plans de symétrie de l'ion mais ce ne sont pas les seuls éléments de symétrie !

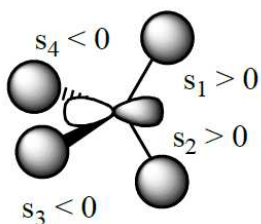
Orbitale	φ_1	φ_2	φ_3	φ_4	s	p_x	p_y	p_z
xy	S	S	A	S	S	S	S	A
yz	S	S	S	A	S	A	S	S

Ce tableau semble prévoir que 4 orbitales peuvent interagir à savoir φ_1 , φ_2 , s et p_y .

On a aussi les interactions à 2 orbitales φ_3 et p_z , φ_4 et p_x .

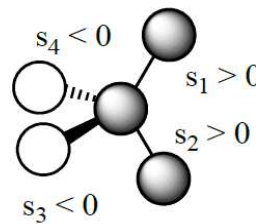
B2. Intégrale de recouvrement entre φ_1 et p_y

Il y a 4 recouvrements s_1 à s_4 . Ces recouvrements s'annulent 2 à 2. Au final le recouvrement entre ces deux orbitales est nul. φ_1 et p_y n'interagissent pas.



Intégrale de recouvrement entre φ_2 et s

Il y a 4 recouvrements s_1 à s_4 . Ces recouvrements s'annulent 2 à 2. Au final le recouvrement entre ces deux orbitales est nul. φ_2 et s n'interagissent pas.



B3. Chaque orbitale ne pouvant se combiner qu'avec une orbitale présentant les mêmes éléments de symétrie, il reste comme combinaison possible : φ_1 et s, φ_2 et p_y , φ_3 et p_z , φ_4 et p_x soit quatre interactions à deux orbitales.

B4. Représentation des orbitales ψ_1 à ψ_4

	ψ_1 : liante	ψ_2 : liante	ψ_3 : liante	ψ_4 : liante
Interaction entre	φ_1 et s	φ_2 et p_y	φ_3 et p_z	φ_4 et p_x

B5. N a 5 électrons de valence, chaque H a 1 électron de valence, l'espèce est chargée positivement : il y a donc 8 électrons, qui occupent les OM $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4 = \text{HO}$ tandis que $\psi_5 = \text{BV}$, ψ_6, ψ_7, ψ_8 sont vides.

L'indice de liaison est par définition : $il = (n - n^*) / 2 = 4$ ce qui est en accord avec les quatre liaisons simples N-H du schéma de Lewis mais les quatre doublets liants n'ont pas la même énergie.