

### *Système hydrogénécarbonés conjugués.*

Une méthode d'étude rapide des électrons  $\pi$  repose sur le modèle de Hückel.

- 1- On note  $\alpha$  l'intégrale coulombienne. Qu'entend-on par intégrale coulombienne ?
- 2- L'intégrale de résonance est notée  $\beta$ . Que représente  $\beta$  ?
- 3- L'intégrale coulombienne du fluor est donnée par  $\alpha_F = \alpha + 3\beta$ . Commenter cette valeur.
- 4- L'équation séculaire s'écrit  $|H_{i,j} - E \cdot S_{i,j}| = 0 = 0$ . On pose  $x = \frac{\alpha - E}{\beta}$ .
  - 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.