

Système hydrogénécarbonés conjugués.

Une méthode d'étude rapide des électrons π repose sur le modèle de Hückel.

- 1- On note α l'intégrale coulombienne. Qu'entend-on par intégrale coulombienne ?
- 2- L'intégrale de résonance est notée β . Que représente β ?
- 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.