

TD1

On souhaite étudier l'ion NO^+ .

1. Donner la représentation de Lewis de l'ion NO^+ .
2. On veut à présent étudier l'ion NO^+ en utilisant le modèle L.C.A.O. Dans ce modèle, seules les [orbitales atomiques de valence](#) (O.A.) sont concernées et seules les orbitales atomiques ayant les mêmes symétries par rapport aux éléments de symétrie de l'ion peuvent se combiner. La première étape consiste à regrouper les O.A. pouvant interagir.

Dans ce problème, on considère l'axe de symétrie NO de l'ion, pris comme l'axe z, et les plans σ_{xz} et σ_{yz} comme éléments de symétrie pertinents..

- o Quelles sont les [orbitales atomiques de valence](#) des atomes N et O ?
- o Quelles sont leurs symétries par rapport à l'axe de symétrie NO de l'ion ?

Regrouper les O.A. pouvant se combiner entre elles. Pour chaque groupe, préciser si leur combinaison formera des orbitales moléculaires (O.M.) [σ ou π](#). Préciser également, le nombre d'O.M. σ et π qui seront obtenues.

3. Pour simplifier la construction des OM, on ne combine que les O.A. dont les énergies diffèrent de moins de 5 eV.
 - o Donner les combinaisons linéaires des OA formant des OM σ ou π .
 - o Préciser le caractère liant, antiliant ou non-liant des OM obtenues.
 - o Proposer un diagramme possible d'énergie des OM.
4. Ce diagramme ne permet pas de rendre compte des propriétés électroniques de l'ion NO^+ . On combine donc entre elles les OA dont les énergies diffèrent de moins de 10 eV.
 - o Dans ce cas, quelles OA se combinent entre elles pour donner des OM σ ?
 - o L'ordre des O.M. de NO^+ est le même que celui des [O.M. de CO](#). En utilisant les résultats de la question précédente, expliquer la différence entre les deux diagrammes.
5. On considère à présent uniquement le diagramme d'énergie construit dans la question 4. Placer les [électrons de valence](#) de NO^+ dans ce diagramme d'énergie.
 - o Quel est l'indice de liaison ? Comparer ce résultat aux prédictions données par le modèle de Lewis.
 - o D'après le modèle L.C.A.O., l'ion NO^+ est-il [paramagnétique ou diamagnétique](#) ?
 - o Dans quel sens est orienté le moment dipolaire de NO^+ ?
6. Comment varie la longueur de la liaison quand on passe de NO^+ à NO ? Justifier votre réponse.

On donne :

$$\epsilon_{2sO} = -32.4 \text{ eV} ; \epsilon_{2pO} = -15.9 \text{ eV} ; \epsilon_{2sN} = -25.6 \text{ eV} ; \epsilon_{2pN} = -12.9 \text{ eV}$$