

# PROGRAMME DE COLLE n°3

Semaine du 29/09 au 03/10

## Modélisation quantique : orbitales moléculaires et prévisions de la réactivité

Notions et contenus	Capacités exigibles
<p><b>Construction des orbitales moléculaires</b></p> <p>Méthode de Combinaison Linéaire des Orbitales Atomiques.</p> <p>Interaction de deux orbitales atomiques sur deux centres :</p> <ul style="list-style-type: none"><li>- recouvrement ;</li><li>- orbitales liante, antiliante, non liante ;</li><li>- énergie d'une orbitale moléculaire ;</li><li>- orbitale <math>\sigma</math>, orbitale <math>\pi</math> ;</li><li>- représentation conventionnelle d'une orbitale moléculaire par schématisation graphique de la combinaison linéaire des orbitales atomiques.</li></ul> <p>Interaction d'orbitales de fragments.</p> <p>Diagramme d'orbitales moléculaires : occupation des niveaux, orbitales frontalières haute occupée et basse vacante, cas des entités radicalaires.</p> <p>Ordre de liaison dans les molécules diatomiques.</p>	<p>Identifier les conditions d'interaction de deux orbitales atomiques : recouvrement et critère énergétique.</p> <p>Construire des orbitales moléculaires de molécules diatomiques par interaction d'orbitales atomiques du même type (s-s, p-p).</p> <p>Reconnaître le caractère liant, antiliant, non liant d'une orbitale moléculaire à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'iso-densité.</p> <p>Identifier la symétrie <math>\sigma</math> ou <math>\pi</math> d'une orbitale moléculaire à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'iso-densité.</p> <p>Proposer une représentation conventionnelle d'une orbitale moléculaire tenant compte d'une éventuelle dissymétrie du système.</p> <p>Justifier la dissymétrie d'une orbitale moléculaire obtenue par interaction d'orbitales atomiques centrées sur des atomes d'éléments différents.</p> <p>Prévoir ou interpréter l'ordre énergétique des orbitales moléculaires et établir qualitativement un diagramme énergétique d'orbitales d'une molécule diatomique.</p> <p>Justifier l'existence d'interactions entre orbitales de fragment en termes de recouvrement ou d'écart d'énergie.</p>
	<p>Décrire l'occupation des niveaux d'un diagramme d'orbitales moléculaires.</p> <p>Identifier les orbitales frontalières à partir d'un diagramme d'orbitales moléculaires de valence fourni.</p> <p>Interpréter un diagramme d'orbitales moléculaires obtenu par interaction des orbitales de deux fragments, fournies.</p> <p>Relier, dans une molécule diatomique, l'évolution des caractéristiques de la liaison à l'évolution de l'ordre de liaison.</p>

	<p>Décrire l'occupation des niveaux d'un diagramme d'orbitales moléculaires.</p> <p>Identifier les orbitales frontalières à partir d'un diagramme d'orbitales moléculaires de valence fourni.</p> <p>Interpréter un diagramme d'orbitales moléculaires obtenu par interaction des orbitales de deux fragments, fournies.</p> <p>Relier, dans une molécule diatomique, l'évolution des caractéristiques de la liaison à l'évolution de l'ordre de liaison.</p>
<p><b>Prévision de la réactivité</b></p> <p>Approximation des orbitales frontalières.</p>	<p>Utiliser les orbitales frontalières pour prévoir la réactivité nucléophile ou électrophile d'une entité (molécule ou ion).</p> <p>Interpréter l'addition nucléophile sur le groupe carbonyle et la substitution nucléophile en termes d'interactions frontalières.</p> <p>Comparer la réactivité de deux entités à l'aide des orbitales frontalières.</p>