

PROGRAMME DE COLLE n°4

Semaine du 06/10 au 10/10

Modélisation quantique : orbitales moléculaires et prévisions de la réactivité

Notions et contenus	Capacités exigibles
Construction des orbitales moléculaires Méthode de Combinaison Linéaire des Orbitales Atomiques. Interaction de deux orbitales atomiques sur deux centres : - recouvrement ; - orbitales liante, antiliante, non liante ; - énergie d'une orbitale moléculaire ; - orbitale σ, orbitale π ; - représentation conventionnelle d'une orbitale moléculaire par schématisation graphique de la combinaison linéaire des orbitales atomiques. Interaction d'orbitales de fragments. Diagramme d'orbitales moléculaires : occupation des niveaux, orbitales frontalières haute occupée et basse vacante, cas des entités radicalaires. Ordre de liaison dans les molécules diatomiques.	Identifier les conditions d'interaction de deux orbitales atomiques : recouvrement et critère énergétique. Construire des orbitales moléculaires de molécules diatomiques par interaction d'orbitales atomiques du même type (s-s, 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. Identifier la symétrie σ ou π d'une orbitale moléculaire à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'iso-densité. Proposer une représentation conventionnelle d'une orbitale moléculaire tenant compte d'une éventuelle dissymétrie du système. Justifier la dissymétrie d'une orbitale moléculaire obtenue par interaction d'orbitales atomiques centrées sur des atomes d'éléments différents. Prévoir ou interpréter l'ordre énergétique des orbitales moléculaires et établir qualitativement un diagramme énergétique d'orbitales d'une molécule diatomique. Justifier l'existence d'interactions entre orbitales de fragment en termes de recouvrement ou d'écart d'énergie.
	Décrire l'occupation des niveaux d'un diagramme d'orbitales moléculaires. Identifier les orbitales frontalières à partir d'un diagramme d'orbitales moléculaires de valence fourni. Interpréter un diagramme d'orbitales moléculaires obtenu par interaction des orbitales de deux fragments, fournies. Relier, dans une molécule diatomique, l'évolution des caractéristiques de la liaison à l'évolution de l'ordre de liaison.

	Décrire l'occupation des niveaux d'un diagramme d'orbitales moléculaires. Identifier les orbitales frontalières à partir d'un diagramme d'orbitales moléculaires de valence fourni. Interpréter un diagramme d'orbitales moléculaires obtenu par interaction des orbitales de deux fragments, fournies. Relier, dans une molécule diatomique, l'évolution des caractéristiques de la liaison à l'évolution de l'ordre de liaison.
--	---

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

Révisions de cinétique de PCSI :

Notions et contenus	Capacités exigibles
Modélisation microscopique d'une transformation chimique Modélisation d'une transformation par deux actes élémentaires opposés, état d'équilibre d'un système. Modélisation d'une transformation par un mécanisme constitué par plusieurs actes élémentaires successifs ; étape cinétiquement déterminante, approximation de l'état quasi-stationnaire, équilibre rapidement établi, loi de vitesse associée.	Relier la constante thermodynamique d'équilibre aux constantes de vitesse dans le cas d'une transformation modélisée par deux actes élémentaires opposés. Reconnaître, à partir d'informations fournies, l'étape cinétiquement déterminante d'un mécanisme ou les conditions d'utilisation de l'approximation de l'état quasi-stationnaire d'un intermédiaire réactionnel. Établir la loi de vitesse de consommation d'un réactif ou de formation d'un produit à partir d'un mécanisme réactionnel simple et d'informations fournies.
Contrôle cinétique, contrôle thermodynamique.	Reconnaître les paramètres qui favorisent la formation d'un produit dans le cas de deux réactions compétitives.