PROGRAMME DE COLLES – CHIMIE – PC

Semaine du 15/09 au 19/09

CONSTITUTION DE LA MATIERE : MODELISATION QUANTIQUE ET REACTIVITE

Chapitre 1 : Orbitales atomiques

I. Les bases de la mécanique quantique

1. Principe d'incertitude de Heisenberg
2. Fonction d'onde
 - a) Définition
 - b) Probabilité de présence
3. Comment trouver la fonction d'onde associée à un électron

II. L'atome d'hydrogène et les ions hydrogénoïde

1. Solution de l'équation de Schrödinger : fonction d'onde et énergie
2. Les nombres quantiques
 - a) Le nombre quantique principal : n
 - b) Le nombre quantique secondaire orbital : ℓ
 - c) Le nombre quantique magnétique : m_ℓ
 - d) Le nombre quantique magnétique m_s
3. Diagramme énergétique pour un système hydrogénoïde
4. Représentations des orbitales atomiques
 - a) Densité de probabilité de présence radiale
 - b) Densité de probabilité de présence angulaire et représentation conventionnelle des OA

III. Configuration électronique des systèmes polyélectroniques

1. Définitions
2. Règles de remplissage
 - b. Principe d'exclusion de Pauli
 - c. Principe de stabilité : règle de Klechkowski
 - d. Règle de Hund
3. Electron de cœur et électron de valence
4. Configuration électronique des ions

IV. Architecture du tableau périodique des éléments

1. L'atome, l'élément chimique et la masse molaire
2. Structure de la classification périodique
3. Notion de blocs
4. Familles et périodes
5. Métaux et non-métaux
6. Evolution de quelques propriétés atomiques dans la CP
 - a) L'électronégativité
 - b) Notion de charge effective et écrantage
 - c) OA et niveaux d'énergie
 - d) Rayon des OA et notion de polarisabilité

Logiciels et site utiles : ORBIMOL:

<https://www.lct.jussieu.fr/pagesperso/orbimol/fr/index-fr.shtml>

Objectifs du chapitre

Savoirs

☞ Définir les termes :

Fonction d'onde, densité de probabilité de présence, système hydrogénoïde, OA dégénérées, densité de probabilité radiale, rayon d'une OA, surface nodale, charge effective, écrantage (ou effet d'écran), élément chimique, isotope, les quatre nombres quantiques, électron de cœur, électron de valence, diamagnétique, paramagnétique, famille chimique, alcalin, alcalino-terreux, halogène, gaz rare, électronégativité, rayon atomique.

☞ Capacités exigibles :

- Interpréter $|\psi|^2$ comme la densité de probabilité de présence d'un électron en un point.

PROGRAMME DE COLLES – CHIMIE – PC

- Prévoir qualitativement, pour l'atome d'hydrogène et les ions hydrogénoïdes, l'évolution du rayon et de l'énergie associés à une OA en fonction du nombre quantique principal
- Dessiner l'allure des OA s et p
- Etablir la configuration électronique d'un atome ou d'un ion dans son état fondamental
- Déterminer le nombre d'électrons non appariés d'un atome dans son état fondamental
- Relier qualitativement l'évolution du rayon associé à une OA à la charge effective
- Relier qualitativement l'énergie associée à une OA à l'électronégativité de l'atome
- Relier qualitativement le rayon associé aux OA de valence d'un atome à sa polarisabilité
- Relier la position d'un élément dans le tableau périodique à la configuration électronique de l'atome associé à son état fondamental.

Chapitre 2 : Le modèle quantique de la liaison chimique – orbitales moléculaires

I. La théorie des orbitales moléculaires (OM)

1. Fonction d'onde d'une molécule, approximation de Born-Oppenheimer
2. Approximation orbitale
3. Théorie CLOA (Combinaison Linéaire d'Orbitales Atomiques)

II. Molécules diatomiques de la première période

1. Expressions des orbitales moléculaires
 - b) Probabilité de présence
 - c) Intégrale de recouvrement
 - d) Expressions des deux solutions
2. Représentations et caractéristiques des OM de H₂
3. Diagrammes d'orbitales moléculaires
 - a) Energie de stabilisation ou de déstabilisation des OM
 - b) Remplissage

Objectifs du chapitre

☞ Définir les termes :

Approximation de Born-Oppenheimer, approximation orbitale, OM, CLOA, intégrale de recouvrement, OA qui interagissent, surface d'isodensité, OM liante/antiliante, diagramme d'OM

☞ Capacités exigibles :

- Reconnaître le caractère liant ou antiliant d'une OM à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'isodensité
- Identifier la symétrie σ OM à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'isodensité
- Prévoir l'ordre énergétique des OM et établir qualitativement le diagramme énergétique d'orbitale de H₂

REVISIONS DE PCSI – CHIMIE DES SOLUTIONS

Chapitre : Réactions acido-basiques

Etre capable de :

- Exprimer la constante d'acidité associée à un couple acido-basique
- Donner la relation du pH à l'équilibre d'une solution contenant un acide et sa base conjuguée (relation de Henderson)
- Calcul d'un pH simple, calcul d'un pH à partir d'un mélange d'acides et de bases
- Donner les pK_A des couples de l'eau
- Construire le diagramme de prédominance d'un acide ou d'un polyacide
- Dosages acido-basique (revoir les TP avec les dosages acido-basiques effectués en PCSI)