

# PROGRAMME DE COLLES – CHIMIE – PC

Semaine du 22/09 au 26/09

## CONSTITUTION DE LA MATIERE : MODELISATION QUANTIQUE ET REACTIVITE

### Chapitre 1 : Orbitales atomiques

#### I. Les bases de la mécanique quantique

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

#### III. Configuration électronique des systèmes polyélectroniques

#### 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
  2. Métaux et non-métaux
  3. Evolution de quelques propriétés atomiques dans la CP

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.
- 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.

# PROGRAMME DE COLLES – CHIMIE – PC

## 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 orbitalaire
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 H<sub>2</sub>
3. Diagrammes d'orbitales moléculaires
  - a) Energie de stabilisation ou de déstabilisation des OM
  - b) Remplissage et utilisation
  - c) Application à l'ion moléculaire He<sub>2</sub><sup>+</sup> et He<sub>2</sub>
4. Combinaison linéaire de deux OA 1s d'énergie différentes
  - a) Allures des OM
  - b) Surface d'isodensité et diagramme d'interaction de l'ion HeH<sup>+</sup>

### III. Molécules de type A<sub>2</sub> des éléments de la deuxième période (de Li<sub>2</sub> à Ne<sub>2</sub>)

1. Interactions entre OA, principe de construction du diagramme
2. Diagrammes d'OM
  - a) Diagramme non corrélé
  - b) Diagramme corrélé

### IV. Molécules diatomiques hétéronucléaires AB

2. Etude du fluorure d'hydrogène HF
3. Etude de l'hydrure de lithium

## Objectifs du chapitre

### ➡ Définir les termes :

Approximation de Born-Oppenheimer, approximation orbitalaire, OM, CLOA, intégrale de recouvrement, OA qui interagissent, surface d'isodensité, recouvrement axial/latéral, OM liante/antiliante/non-liante, indice de liaison, OM dissymétrique, diagramme corrélé/non corrélé.

### ➡ Capacités exigibles :

- Identifier les conditions d'interaction de deux OA : recouvrement et critère énergétique
- Construire des OM de molécules diatomiques par interaction d'OA de même type (s-s, p-p)
- Reconnaître le caractère liant, antiliant ou non-liant d'une OM à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'isodensité
- Identifier la symétrie  $\sigma$  ou  $\pi$  d'une OM à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'isodensité
- Proposer une représentation conventionnelle d'une OM tenant compte d'une éventuelle dissymétrie du système
- Justifier la dissymétrie d'une OM obtenue par interaction d'OA centrées sur des atomes d'éléments différents.
- Prévoir l'ordre énergétique des OM et établir qualitativement un diagramme énergétique d'orbitale 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'énergie d'un diagramme d'OM  
Identifier les orbitales frontalières à partir d'un diagramme d'OM de valence fourni
- Relier dans une molécule diatomique l'évolution de la longueur et de l'énergie de la liaison à l'évolution de l'ordre de la liaison

### 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)