

PROGRAMME DE COLLES – CHIMIE – PC

Semaine du 29/09 au 03/10

CONSTITUTION DE LA MATIERE : MODELISATION QUANTIQUE ET REACTIVITE

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
 - a) Probabilité de présence
 - b) Intégrale de recouvrement
 - c) 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 et utilisation
 - c) Application à l'ion moléculaire He₂⁺ et He₂
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⁺

III. Molécules de type A₂ des éléments de la deuxième période (de Li₂ à Ne₂)

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

IV. Molécules plus complexes : méthode des fragments

1. L'hydrure de béryllium BeH₂
2. L'eau H₂O

Objectifs du chapitre

➤ Définitions

Approximation de Born-Oppenheimer, approximation orbitale, 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, orbitale de fragment, diagramme d'OM, orbitales frontalières, HO (haute occupée) et BV (basse vacante).

➤ 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 σ ou π 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.

PROGRAMME DE COLLES – CHIMIE – PC

- 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
- Interpréter un diagramme d'OM obtenu par interaction des orbitales de deux fragments, fournies.
- Relier dans une molécule diatomique l'évolution de la longueur et de la constante de force de la liaison à l'évolution de l'ordre de la liaison
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 3 : Approximation des orbitales frontalières

I. Les différents types de sélectivité en chimie organique

1. Nucléophile et électrophile
2. Sélectivité d'une réaction
 - a) Chimiosélectivité

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)