PROGRAMME DE COLLES – CHIMIE – PC

Semaine du 21/09 au 25/09

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 orbitalaire
3. Théorie CLOA (Combinaison Linéaire d'Orbitales Atomiques)

II. Molécules diatomiques de la première période

1.Expressions des orbitales moléculaires

Probabilité de présence
Intégrale de recouvrement
Expressions des deux solutions

2.Représentations et caractéristiques des OM de H_2

Diagrammes d'orbitales moléculaires
Energie de stabilisation ou de déstabilisation des OM
Remplissage et utilisation
Application à l'ion moléculaire He_2^+ et He_2

3. 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 A_2 des éléments de la deuxième période (de Li_2 à Ne_2)

Interactions entre OA, principe de construction du diagramme
Diagrammes d'OM
Diagramme non corrélé
Diagramme corrélé

IV. Molécules diatomiques hétéronucléaires AB

1. Etude du fluorure d'hydrogène HF

Objectifs du chapitre

Savoirs

➲ **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, diagramme d'OM.

➲ **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)
- Reconnaitre 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.
- Décrire l'occupation des niveaux d'énergie d'un diagramme d'OM
- 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

PROGRAMME DE COLLES – CHIMIE – PC

Chapitre 1 : Orbitales atomiques

I. Les bases de la mécanique quantique

1. Principe d'incertitude de Heisenberg
2. Fonction d'onde
   b) Définition
   c) Probabilité de présence
3. Comment trouver la fonction d'onde associé 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
   c) L'électronégativité
   d) Notion de charge effective et écrantage
   e) OA et niveaux d'énergie
   f) Rayon atomique et 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, 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.

REVISIONS DE PCSI – EXERCICES DE REVISIONS DES VACANCES D'ETE

Exercices et corrigés envoyés le lundi 17/08