

# PROGRAMME DE COLLES – CHIMIE – PC

Semaine du 18/09 au 22/09

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 associé à un électron

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

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 :  $\ell$
  - c. Le nombre quantique magnétique :  $m\ell$
  - 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

- a) Principe d'exclusion de Pauli
- b) Principe de stabilité : règle de Klechkowski
- c) 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

### Objectifs du chapitre :

- 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.

# PROGRAMME DE COLLES – CHIMIE – PC

## ↻ 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.

## 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
  - a) Probabilité de présence
  - b) Intégrale de recouvrement
  - c) 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

## ↻ Définir les termes :

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

## ↻ 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)
- Reconnaître le caractère liant ou antiliant d'une OM à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'isodensité
- Identifier la symétrie  $\sigma$  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

## Chimie des solutions : TP n°1, dosages de mélanges d'acides ou de polyacides