

PROGRAMME DE COLLES – CHIMIE – PC

Semaine du 02/10 au 06/10

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

1. Etude du fluorure d'hydrogène HF

2. Etude de l'hydruure de lithium

IV. Molécules plus complexes : méthode des fragments

1. L'hydruure de béryllium BeH₂
2. L'eau H₂O
3. L'éthène H₂C=CH₂ (extrait épreuve E3A 2018)

☞ Définir les termes :

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.
- Décrire l'occupation des niveaux d'énergie d'un diagramme d'OM

PROGRAMME DE COLLES – CHIMIE – PC

- 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

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

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
 - b) Régiosélectivité
 - c) Stéréosélectivité
3. Les effets électroniques
 - a) La gêne stérique
 - b) L'effet inductif et l'effet mésomère

➡ Définir les termes :

Orbitales frontalières, HO, BV, réaction chimiosélective, réaction régiosélective, réaction stéréosélective.