

# PROGRAMME DE COLLES – CHIMIE – PC

Semaine du 30/09 au 04/09

## 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
  - 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
  - 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

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

## 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, 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  $\sigma$  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
- 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

# PROGRAMME DE COLLES – CHIMIE – PC

---

## 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

### Savoirs

#### ➡ Définir les termes :

Contrôle frontalier, orbitales frontalières, HO, BV, réaction chimiosélective, réaction régiosélective, réaction stéréosélective.

REVISIONS DE PCSI – CHIMIE DES SOLUTIONS
--

### Chapitre : Réactions acido-basiques + TP n°1 Dosages de polyacides/mélanges d'acides

#### 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
- Exprimer la constante d'équilibre d'une réaction acido-basique à partir des  $pK_A$  des couples mis en jeu

- Enoncer la méthode de la réaction prépondérante.
- Utiliser un diagramme de prédominance pour vérifier si des espèces peuvent coexister ou sont incompatibles