

SEMAINE 1

- **Chap A-1 : Les orbitales atomiques**
- **Chap A-2 : les orbitales moléculaires**
- **Révisions SUP :**
 - Structure électronique de l'atome
 - Structure électronique des molécules (Structure de Lewis, mésomérie, VSEPR, moment dipolaire)
 - Stéréochimie : conformation/configuration

Savoirs et savoirs faire :

➤ **Chap A-1 :**

- Établir une configuration électronique fondamentale (d'atome, d'ion)
- Différencier les e- de cœur, de valence, les systèmes dia ou paramagnétiques
- Notion de charge effective
- Les formules du rayon atomique et de l'énergie d'une OA ou d'un atome.
- L'allure des OA de type ns, np (en fonction du système d'axe)
- L'évolution au sein de la classification périodique, du rayon, des énergies des e- les plus externes, de l'électronégativité et de la polarisabilité

Notes aux colleurs : Les étudiants ne découvrent la chimie quantique qu'en 2nde année.

Le modèle de **Slater n'est PAS dans les connaissances exigibles** par contre il peut être donné en exercice si un document l'explique (cf TD)

Aucun calcul sur les fonctions d'onde.

L'allure des OA n'est plus au programme

➤ **Chap A-2 :**

- Différencier les OM liante, antiliante et non-liante ; Différencier les OM σ et π
- Classer les OM selon leur énergie
- Construire le diagramme **NON corrélé** d'OM d'une molécule diatomique par CLOA
- Interpréter le diagramme d'OM d'une plus grosse molécule à l'aide de la méthode des fragments
- Décompter les e- et les placer dans les OM
- Calculer l'indice de liaison

Notes aux colleurs : le **diagramme corrélé ($Li_2 \dots N_2$) n'est PAS dans les connaissances exigibles** il doit être donné

Liste de questions de cours :

A1 :

1. Configurations électroniques des atomes et des ions (règles ; ex.) ; lien avec la position dans la classification périodique.
2. Evolution des propriétés atomiques dans la classification périodique (notion de charge effective, rayon, énergie, électronégativité, polarisabilité)

Révisions SUP

3. Chiralité
4. ***Obtention d'un énantiomère pur
5. Stéréochimie de conformation ; cas des chaînes ouvertes (éthane, butane)

A2

6. Diagramme des OM des espèces diatomiques homonucléaires de la première ligne (intro sur les conditions d'interaction des 2 OA, présenter le diagramme d'OM, applications)
7. Diagramme des OM des molécules homonucléaires de la deuxième ligne du tableau périodique (diagramme décorrélé principe de construction, application, modification pour le diagramme corrélé, application)
8. ***Diagramme des OM dans le cas d'espèces hétéronucléaires (intro sur les conditions du mélange de deux OA, cas de HHe^+ puis de HF , caractéristiques de la liaison)
9. ***Méthode des fragments choisir un exemple H_2O ou BeH_2 (plus simple car linéaire)