

Une question de cours de chimie organique de moins de 5 minutes vous sera posé en début de colle.

Cours et exercices : Q2 : orbitales moléculaires

| Notions et contenus   | Capacités exigibles   |
|---|---|
| <p><b>Construction des orbitales moléculaires</b></p> <p>Méthode de Combinaison Linéaire des Orbitales Atomiques.</p> <p>Interaction de deux orbitales atomiques sur deux centres :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- recouvrement ;</li> <li>- orbitales liante, antiliante, non liante ;</li> <li>- énergie d'une orbitale moléculaire ;</li> <li>- orbitale <math>\sigma</math>, orbitale <math>\pi</math> ;</li> <li>- représentation conventionnelle d'une orbitale moléculaire par schématisation graphique de la combinaison linéaire des orbitales atomiques.</li> </ul> <p>Interaction d'orbitales de fragments.</p> <p>Diagramme d'orbitales moléculaires : occupation des niveaux, orbitales frontalières haute occupée et basse vacante, cas des entités radicalaires.</p> <p>Ordre de liaison dans les molécules diatomiques.</p> | <p>Identifier les conditions d'interaction de deux orbitales atomiques : recouvrement et critère énergétique.</p> <p>Construire des orbitales moléculaires de molécules diatomiques par interaction d'orbitales atomiques du même type (s-s, p-p).</p> <p>Reconnaître le caractère liant, antiliant, non liant d'une orbitale moléculaire à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'iso-densité.</p> <p>Identifier la symétrie <math>\sigma</math> ou <math>\pi</math> d'une orbitale moléculaire à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'iso-densité.</p> <p>Proposer une représentation conventionnelle d'une orbitale moléculaire tenant compte d'une éventuelle dissymétrie du système.</p> <p>Justifier la dissymétrie d'une orbitale moléculaire obtenue par interaction d'orbitales atomiques centrées sur des atomes d'éléments différents.</p> <p>Prévoir ou interpréter l'ordre énergétique des orbitales moléculaires et établir qualitativement un diagramme énergétique d'orbitales d'une molécule diatomique.</p> <p>Justifier l'existence d'interactions entre orbitales de fragment en termes de recouvrement ou d'écart d'énergie.</p> |

|  |   |
|--|---|
|  | <p>Décrire l'occupation des niveaux d'un diagramme d'orbitales moléculaires.</p> <p>Identifier les orbitales frontalières à partir d'un diagramme d'orbitales moléculaires de valence fourni.</p> <p>Interpréter un diagramme d'orbitales moléculaires obtenu par interaction des orbitales de deux fragments, fournies.</p> <p>Relier, dans une molécule diatomique, l'évolution des caractéristiques de la liaison à l'évolution de l'ordre de liaison.</p> |
|--|---|

### Cours et exercices : Q3

|  |  |
|--|--|
| <p>Enthalpie libre standard d'activation, enthalpie standard d'activation, entropie standard d'activation.</p> | <p>Déterminer une enthalpie standard ou une entropie standard d'activation à partir de données cinétiques, la relation d'Eyring étant fournie.</p> <p>Relier l'entropie standard d'activation aux contraintes dans l'état de transition.</p>   |
| <p><b>Prévision de la réactivité</b></p> <p>Approximation des orbitales frontalières.</p>                      | <p>Utiliser les orbitales frontalières pour prévoir la réactivité nucléophile ou électrophile d'une entité (molécule ou ion).</p> <p>Interpréter l'addition nucléophile sur le groupe carbonyle et la substitution nucléophile en termes d'interactions frontalières.</p> <p>Comparer la réactivité de deux entités à l'aide des orbitales frontalières.</p> |

### Cours uniquement : O\_4 Diels Alder

| <b>Notions et contenus</b>  | <b>Capacités exigibles</b>   |
|---|--|
| <p><b>Réaction de Diels-Alder</b></p> <p>Diastéréosélectivité, stéréospécificité, régiosélectivité, influence de la structure des réactifs sur la vitesse de la transformation (règle d'Alder).</p> <p>Réaction de rétro-Diels-Alder.</p> | <p>Identifier les interactions orbitales mises en jeu entre les réactifs.</p> <p>Interpréter les résultats cinétiques, stéréochimiques et la régiosélectivité d'une réaction de Diels-Alder sous contrôle cinétique.</p> |