

## PROGRAMME DE COLLES DE CHIMIE PC

### SEMAINE N°8 : 27 NOVEMBRE AU 2 DECEMBRE

#### COURS

#### CHAPITRE 1 : ORBITALES ATOMIQUES

##### I. Préliminaires

- I.1 Caractéristiques de l'atome
- I.2 Caractéristiques de la lumière : dualité onde/corpuscule
- I.3 Interaction lumière matière

##### II. Description probabiliste de l'atome (pas de question de cours sur ce paragraphe)

- II.1 Principes de la mécanique quantique
- II.2 Densité de probabilité de présence de l'électron
- II.3 Équation de Schrödinger (hors programme)

##### III. Modèle quantique de l'atome d'hydrogène

- III.1 Résultats quantiques pour l'atome d'hydrogène
  - III.1.1 Repérage de l'électron en coordonnées sphériques
  - III.1.2 Orbitales atomiques
  - III.1.3 Nombres quantiques
- III.2 Représentation des orbitales atomiques

→ seule question de cours possible sur le paragraphe III.2 : « représentations conventionnelles des OA s, p »

- III.3 Cas des hydrogénoïdes

##### IV. Modèle quantique pour les atomes polyélectroniques

- IV.1 Position du problème
- IV.2 Approximation orbitale ou monoélectronique
- IV.3 Résolution de l'équation de Schrödinger
- IV.4 Configurations électroniques

##### V. Architecture du tableau périodique des éléments

- V.1 Construction historique
- V.2 Configuration électronique et tableau périodique des éléments
- V.3 Ensemble d'éléments particuliers
  - V.3.1 Métaux et non-métaux
  - V.3.2 Familles (colonnes) célèbres

##### VI. Évolution de quelques propriétés dans la classification périodique des éléments

- VI.1 Évolution du nombre quantique principal n et de la charge effective  $Z^*$
- VI.2 Énergie des OA et électronégativité
- VI.3 Rayon atomique et polarisabilité
- VI.4 Bilan général

#### CHAPITRE 2 : ORBITALES MOLECULAIRES

##### I. Position du problème – Hypothèses fondamentales

- I.1 Approximation de Born Oppenheimer
- I.2 Approximation monoélectronique ou orbitale
- I.3 Méthode CLOA (ou LCAO)

##### II. Interaction de deux OA identiques sur deux centres

- II.1 Application à la molécule de dihydrogène
- II.2 Densité de probabilité de présence
- II.3 Représentation des OM

##### III. Énergie des orbitales moléculaires

- III.1 Molécules homonucléaires : interaction de 2 OA identiques
- III.2 Molécules hétéronucléaires : interaction de 2 OA différentes

##### IV. Recouvrement des orbitales atomiques

- IV.1 Critère du recouvrement maximum
- IV.2 Les deux types d'orbitales moléculaires
  - IV.2.1 OM  $\sigma$  : recouvrement axial d'OA
  - IV.2.2 OM  $\pi$  : recouvrement latéral d'OA
  - IV.2.3 Comparaison du recouvrement axial et du recouvrement latéral

##### V. Application aux molécules diatomiques

- V.1 Molécules diatomiques homonucléaires  $A_2$ 
  - V.1.1 Principes de construction des diagrammes d'OM
  - V.1.2 Exemple de  $H_2$

→ Le diagramme de  $H_2$  doit être connu par cœur

- V.1.3 Molécules  $A_2$  issues d'atomes de la deuxième ligne du tableau périodique

→ Les diagrammes du cours  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $F_2$ ,  $Cl_2$ , doivent savoir être reconstruits sans indication et sans interaction s-p

→ La notion de diagramme corrélé/non corrélé est hors programme

- V.2 Molécules diatomiques hétéronucléaires AB
  - V.2.1 Molécules de type AH

→ Le diagramme du cours HF doit savoir être reconstruit sans indication et sans interaction à 3 OA

- V.2.2 Molécules de type AB avec  $A, B \neq H$

→ Aucun diagramme à connaître dans cette catégorie

#### TRAVAUX PRATIQUES

CCM (Fiche22)

Recristallisation (Fiche 27)

#### EXERCICES

Structure de la matière : chapitres 1 et 2

→ Pas d'exercice mettant en jeu les expressions analytiques des OA

→ Chapitre 1 : privilégier des exercices autour des configurations électroniques et du tableau périodique

→ Chapitre 2 : seules constructions de diagramme *ex nihilo* autorisées :  $A_2$  ou AB (en négligeant les interactions s-p) ; AH (sans interaction à 3 OA). Pour étudier d'autres cas, on donnera le diagramme déjà ou en partie construit

Révisions PCSI : structure de la matière (modèle de Lewis, méthode VSEPR, mésomérie), interactions non covalentes

→ Un exercice obligatoire sur un de ces thèmes si pas abordé en question de cours