

## PROGRAMME DE COLLES DE CHIMIE PC

### SEMAINE N°9 : 4 AU 9 DÉCEMBRE

#### COURS

#### CHAPITRE 2 : ORBITALES MOLÉCULAIRES

##### 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**

#### CHAPITRE 3 : MÉTHODE DES FRAGMENTS (PAS DE QUESTION DE COURS SUR CE CHAPITRE)

##### I. Principe

##### II. Applications

##### III. Corrélation entre géométries – diagramme de Walsh

- III.1 Principe

##### III.2 Application à la molécule d'eau

#### IV. Systèmes conjugués

- IV.1 Cas de l'éthylène
- IV.2 Cas du butadiène
- IV.3 Conjugaison et planéité
- IV.4 Conjugaison et effet bathochrome

#### TRAVAUX PRATIQUES

Montage à reflux (Fiche 15)

Extraction liquide-liquide (Fiche 19)

#### EXERCICES

Structure de la matière : chapitres 1 à 3

→ **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**

→ **Chapitre 3 : seule construction de diagramme complet *ex nihilo* autorisée :  $BeH_2$  linéaire (traité en cours) ou équivalent ; Pour étudier d'autres cas, on donnera le diagramme déjà ou en partie construit ; dans tous les cas la fragmentation et les éléments de symétrie pertinents sont donnés ; rien d'exigible sur une interaction à trois orbitales.**

Révisions PCS1 : structure de la matière (modèle de Lewis, méthode VSEPR, mésomérie), interactions non covalentes

Rémi Le Roux