

PROGRAMME DE COLLES DE CHIMIE PC*1

SEMAINE N°7 : 17 AU 22 NOVEMBRE

Formules de Lewis de la semaine : CH_3 , NO , SO_3 , HI , CrO_3 , MgH_2 , NO_3^- , PH_5 , PF_3 , SO_4^{2-} , SF_4 , NH_3 , $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$, XeF_4 , C_2H_2 , IBr , $\text{S}_4\text{O}_6^{2-}$, CH_2O , F_2O , NO_2^-

COURS

CHAPITRE 1 : ORBITALES ATOMIQUES

I. Préliminaires (**pas de question de cours sur ce paragraphe**)

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

III. Modèle quantique de l'atome d'hydrogène

III.1 Résultats quantiques pour l'atome d'hydrogène

III.1.1 Orbitales atomiques

III.1.2 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

III.3.1 Résolution de l'équation de Schrödinger

III.3.2 Représentation des OA des hydrogénoïdes

IV. Modèle quantique pour les atomes polyélectroniques

IV.1 Position du problème

IV.2 Approximation orbitalaire 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

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.2.1 Énergie des OA

VI.2.2 Évolution dans la classification périodique

VI.2.3 Électronégativité

VI.3 Rayon atomique et polarisabilité

VI.3.1 Rayon orbitalaire et rayon atomique

VI.3.2 Évolution dans la classification périodique

VI.3.3 Polarizabilité

VI.4 Bilan général

CHAPITRE 2 : ORBITALES MOLECULAIRES DES MOLECULES DIATOMIQUES

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.1.1 Niveaux d'énergie des OM
 - III.1.2 Remplissage des niveaux d'énergie des OM
 - III.1.3 Application aux molécules de la 1^{ère} ligne du tableau périodique
 - III.2 Molécules hétéronucléaires : interaction de 2 OA différentes
 - III.2.1 Niveaux d'énergie des OM
 - III.2.2 Forme des OM
 - IV. Recouvrement des orbitales atomiques
 - IV.1 Critère du recouvrement maximal
 - IV.1.1 Seules les orbitales de valence peuvent se recouvrir
 - IV.1.2 Seules les orbitales de mêmes étiquettes de symétrie peuvent se recouvrir
 - IV.2 Les deux types d'orbitales moléculaires
 - IV.2.1 OM σ : recouvrement axial d'OA
 - IV.2.2 OM π : 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**

Le cas des molécules diatomiques hétéronucléaires AB n'a pas encore été traité

EXERCICES

Thermodynamique : chapitre 9 si nécessaire

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 en négligeant les interactions s-p). 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, mésométrie, interactions non covalentes)

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