

PROGRAMME DE COLLES DE CHIMIE PC*1

SEMAINE N°9 : 1^{ER} AU 6 DECEMBRE

COURS

REVISIONS PCSI : STEREOCHIMIE (CONFORMATION ET CONFIGURATION)

CHAPITRE 2 : ORBITALES MOLECULAIRES DES MOLECULES DIATOMIQUES

I. Position du problème – Hypothèses fondamentales

- I.1 Approximation de Born Oppenheimer
- I.2 Approximation monoélectronique ou orbitalaire
- 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 A₂
 - V.1.1 Principes de construction des diagrammes d'OM
 - V.1.2 Exemple de H₂

→ Le diagramme de H₂ doit être connu par cœur

- V.1.3 Molécules A₂ issues d'atomes de la deuxième ligne du tableau périodique

→ Les diagrammes du cours O₂, N₂, F₂, Cl₂, 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 : ORBITALES MOLECULAIRES DES MOLECULES POLYATOMIQUES

I. Méthode des fragments

I.1 Principe

I.2 Choix de la fragmentation

II. Application aux molécules AH₂

II.1 Diagramme d'OM de BeH₂ linéaire

II.2 Diagramme d'OM de H₂O coudée

II.3 Corrélation entre géométries

II.3.1 Exemple de H₂O

II.3.2 Exemple de BeH₂

III. Application aux molécules AH₃

IV. Étude de l'éthylène

IV.1 Diagramme d'OM de l'éthylène plan

IV.2 Géométrie de l'éthylène

IV.3 Système σ et système π

V. Molécules planes conjuguées

V.1 Exemple du buta-1,3-diène

V.2 Décompte des électrons π

V.3 Stabilité d'un système π conjugué

V.4 Géométrie d'une molécule conjuguée

V.5 Conjugaison et effet bathochrome

TRAVAUX PRATIQUES

CCM (Fiche22)

Recristallisation (Fiche 27)

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 : A₂ 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 : BeH₂ 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 PCSI : stéréochimie (conformation et configuration)

→ **Un exercice obligatoire sur ce thème si pas abordé en question de cours**

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

Rémi Le Roux