

PROGRAMME DE COLLES DE CHIMIE PC*2

SEMAINE N°8 : 25 NOVEMBRE AU 1^{ER} DECEMBRE

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**)
 - 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.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 orbitalaire ou monoélectronique
 - IV.3 Résolution de l'équation de Schrödinger
 - IV.4 Configurations électroniques
 - IV.4.1 Spin
 - IV.4.2 Règles de remplissage
 - IV.4.3 Électrons de valence et électrons de cœur
 - IV.4.4 Configuration électronique des états excités
 - IV.4.5 Configuration électronique des ions
- 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.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 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.1.1 Normalisation
 - II.1.2 Symétrie
 - II.1.3 Résultats
 - 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 maximum

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**

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**