

PROGRAMME DE COLLES DE CHIMIE PC*2

SEMAINE N°9 : 2 AU 8 DECEMBRE

REVISIONS PCSI : STEREOCHIMIE (CONFORMATION ET CONFIGURATION)

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

CHAPITRE 3 : METHODE 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

- 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 : 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 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