

# Programme des colles de chimie PC\*

Semaine 16 : du 24 au 28 janvier 2022

Le programme de première année sur le modèle de l'atome et des molécules (atome, tableau périodique, Lewis et VSEPR) peut évidemment intervenir dans les exercices.

## 1 Orbitales moléculaires (partie du chapitre)

*La méthode des fragments et l'étude de la réactivité ne sont pas encore au programme, on se limite donc à la construction des diagrammes d'OM de molécules diatomiques homo- et hétéronucléaires.*

Obtention des orbitales moléculaires par CLOA : principes de base, interaction entre deux OA identiques sur deux centres : s-s, p-p avec recouvrement axial, p-p avec recouvrement latéral. Interaction entre OA d'énergies différentes. OA orthogonales.

Orbitales moléculaires de molécules diatomiques : principe de construction du diagramme d'OM, construction du diagramme du dioxygène (sans corrélation s-p). Autres exemples de diagrammes de molécules diatomiques : HF, CO. Ordre de liaison.

### Capacités exigibles :

- Identifier les conditions d'interaction de deux orbitales atomiques : recouvrement et critère énergétique (tous exercices).
- Construire des orbitales moléculaires de molécules diatomiques par interaction d'orbitales atomiques du même type (s-s, p-p).
- Reconnaître le caractère liant, antiliant, non liant d'une orbitale moléculaire à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'iso-densité.
- Identifier la symétrie  $\sigma$  ou  $\pi$  d'une orbitale moléculaire à partir de sa représentation conventionnelle ou d'une surface d'iso-densité.
- Proposer une représentation conventionnelle d'une orbitale moléculaire tenant compte d'une éventuelle dissymétrie du système. Justifier la dissymétrie d'une orbitale moléculaire obtenue par interaction d'orbitales atomiques centrées sur des atomes d'éléments différents.
- Prévoir l'ordre énergétique des orbitales moléculaires et établir qualitativement un diagramme énergétique d'orbitales d'une molécule diatomique.
- Décrire l'occupation des niveaux d'un diagramme d'orbitales moléculaires.
- Identifier les orbitales frontalières à partir d'un diagramme d'orbitales moléculaires de valence fourni.
- Interpréter un diagramme d'orbitales moléculaires obtenu par interaction des orbitales de deux fragments, fournies.
- Relier dans une molécule diatomique l'évolution de la longueur et de la constante de force de la liaison à l'évolution de l'ordre de liaison.

## 2 Modèle quantique de l'atome (voir programme précédent)

## 3 Révisions de première année : tableau périodique, modèle de Lewis et VSEPR