

Programme des colles de chimie PC*

Semaine 17 : du 1er au 5 février 2021

Orbitales moléculaires et application à l'étude de la réactivité

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.

Construction d'un diagramme d'OM par la méthode des fragments : exemple de molécules AH_2 linéaires et coudées, exemple du méthanal (fragments CO + H_2). Le programme demande que les fragments soient fournis, la construction complète n'est pas exigible (voir capacités ci-dessous).

Prévision de la réactivité à partir des OM : approximation des orbitales frontalières, exemples de l'addition nucléophile d'un organomagnésien sur le carbonyle et d'un mécanisme SN_2 .

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 σ ou π 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.
- Justifier l'existence d'interactions entre orbitales de fragment en termes de recouvrement ou d'écart d'énergie.
- 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.
- Utiliser les orbitales frontalières pour prévoir la réactivité nucléophile ou électrophile d'une entité (molécule ou ion).
- Interpréter l'addition nucléophile sur le groupe carbonyle et la substitution nucléophile en termes d'interactions frontalières.
- Comparer la réactivité de deux entités à l'aide des orbitales frontalières.

Modèle quantique de l'atome : voir programme précédent

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