

## Structure des entités moléculaires

-Révisions PCSI- PC 1<sup>ère</sup> année : *Modèle de Lewis , modèle VSEPR , modèle de la mésomérie ( structure de Lewis , géométrie autour d'un atome et géométrie d'une molécule , moment dipolaire d'une liaison , d'une molécule )*

- **Modèle quantique**

Approximations ,notions d'OM et de recouvrement

Interactions entre 2 OA

Symétrie  $\sigma$  ou  $\pi$  , caractère liant ou anti-liant

①Diagramme des OM pour  $A_2$  sans interaction s-p

Indice ou ordre de liaison , propriétés par ou diamagnétiques , état de spin , HO , BV et SO : **simplement les identifier**

②Diagramme des OM pour AB , molécule diatomique hétéronucléaire .

③Méthode des fragments : principe et exemples

Se limiter cette semaine à des exemples simples – molécules traitées en cours :  $BeH_2$  et  $H_2O$

**Programme PC 1<sup>ère</sup> année**

Notions et contenus	Capacités exigibles
<b>Modèle de Lewis de la liaison covalente</b> Liaison covalente localisée ; longueur et énergie de la liaison covalente. Schéma de Lewis d'une molécule ou d'un ion monoatomique ou polyatomique (étude limitée aux éléments des blocs s et p)..	Citer l'ordre de grandeur de longueurs et d'énergies de liaison covalente. Déterminer, pour les éléments des blocs s et p, le nombre d'électrons de valence d'un atome à partir de la position de l'élément dans le tableau périodique. Citer les éléments des périodes 1 à 3 du tableau périodique (nom, symbole, numéro atomique). Établir un ou des schémas de Lewis pertinent(s) pour une molécule ou un ion.
Liaison covalente délocalisée : mésomérie	Identifier et représenter les enchainements donnant lieu à une délocalisation électronique. Mettre en évidence une éventuelle délocalisation électronique à partir de données expérimentales
<b>Géométrie et polarité des entités chimiques</b> Structure géométrique d'une molécule ou d'un ion polyatomique. Modèle VSEPR. Représentation de Cram.	Associer qualitativement la géométrie d'une entité à la minimisation de son énergie. Prévoir et interpréter les structures de type $AX_n$ avec $n \leq 4$ et $AX_pE_q$ , avec $p+q = 3$ ou $4$ .
Électronégativité : liaison polarisée, moment dipolaire, molécule polaire	Comparer les électronégativités de deux atomes à partir de données ou de leurs positions dans le tableau périodique. Prévoir la polarisation d'une liaison à partir des électronégativités comparées des deux atomes mis en jeu. Relier l'existence ou non d'un moment dipolaire permanent à la structure géométrique d'une molécule. Déterminer direction et sens du vecteur moment dipolaire d'une liaison ou d'une molécule

**Programme PC 2<sup>ème</sup> année**

Notions et contenus	Capacités exigibles
<b>Construction des orbitales moléculaires</b>  Méthode de Combinaison Linéaire des Orbitales Atomiques.  Interaction de deux orbitales atomiques sur deux centres : - recouvrement ;	-Identifier les conditions d'interaction de deux orbitales atomiques : recouvrement et critère énergétique. -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.

- orbitales liante, antiliante, non liante ;  
- énergie d'une orbitale moléculaire ;  
- orbitale  $\sigma$ , orbitale  $\pi$  ;  
- représentation conventionnelle d'une orbitale moléculaire par schématisation graphique de la combinaison linéaire des orbitales atomiques.

**Interaction d'orbitales de fragments.**

**Diagramme d'orbitales moléculaires :  
occupation des niveaux, orbitales frontalières haute occupée et basse vacante, cas des entités radicalaires.**

Ordre de liaison dans les molécules diatomiques.

-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 ou interpréter 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 des caractéristiques de la liaison à l'évolution de l'ordre de liaison.