

## Programme pour la semaine du 20/11/17 au 24/11/17

### Les orbitales atomiques

Présentation de la fonction d'onde  $\chi(r, \theta, \varphi)$ , densité de probabilité et normalisation.

Cas de l'hydrogénoïde : présentation des solutions exactes sous la forme

$$\chi_{n,\ell,m\ell}(r, \theta, \varphi) = R_{n,\ell}(r) \times Y_{\ell,m\ell}(\theta, \varphi)$$

Analyse de  $R$ , étude de la densité radiale de probabilité et rayon de l'orbitale atomique.

Représentation de la forme associée à  $Y^2$ .

Représentation conventionnelle, étude des symétries : notion de phase et de plan nodal.

Cas de l'atome polyélectronique : hypothèse orbitalaire (monoélectronique). Explication par l'écrantage et la charge effective  $Z^*$ . Energie et rayon de l'orbitale associée.

Le modèle de Slater a été présenté mais ne fait plus partie explicitement du programme.

Conséquences sur l'évolution des propriétés des atomes dans la classification périodique : rayon atomique (et polarisabilité), énergie des OA (et électronégativité).

### Orbitales moléculaires (OM) :

Notion d'orbitales moléculaire et hypothèses associées (Born-Oppenheimer et orbitalaire), signification. Méthode CLOA, notion d'intégrale de recouvrement et diagramme des OM de  $H_2$ . Orbitales moléculaire :  $\sigma$  et  $\sigma^*$ , notions de plan nodal, de caractère liant et anti liant, représentation simplifiée. Application à la non stabilité de  $He_2$ .

Cas des molécules  $A_2$  : exemple de  $O_2$ . Etude des différentes interactions, obtention du diagramme des OM sous l'hypothèse de la non corrélation (on néglige les couplages s/p), orbitales de type  $\sigma^*$  et de type  $\pi^*$ , niveaux dégénérés, configuration électronique de valence.

Remarque : les diagrammes corrélés ont été mentionnés mais ne sont pas au programme explicitement.

Conséquences : ordre de liaison et propriétés magnétiques.

Cas d'une molécule non symétrique : exemple de HF et existence d'OM non liantes, exemple de CO.

Etude de l'interaction de fragments : exemple de  $H_2Be$ .

### Révisions de première année

- Atomistique : configuration électronique d'un atome (règles associées), le tableau périodique.

- Etude d'une molécule : théorie de Lewis / VSEPR / mésomérie

- Réactions de chimie organique : chimie des dérivés halogénés et mécanismes SN 1 et 2 et éliminations.

- Chimie des alcools : synthèse de Williamson