

Programme pour la semaine du 27/11/17 au 01/12/17

Les orbitales atomiques (OA) :

Toutes notions utiles à l'obtention des OM.

Orbitales moléculaires (OM) :

Notion d'orbitales moléculaire et hypothèses associées (Born-Oppenheimer et orbitaire), signification. Méthode CLOA, notion d'intégrale de recouvrement et diagramme des OM de H₂. Orbitales moléculaire : σ et σ^* , notions de plan nodal, de caractère liant et anti liant, représentation simplifiée. Application à la non stabilité de He₂.

Cas des molécules A₂ : exemple de O₂. 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 σ^* et de type π^* , 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 H₂Be.

Cas des systèmes d'OM π : exemple des orbitales frontières de l'éthène.

NB : la théorie de Hückel n'apparaît plus dans les programmes.

Contrôle d'une réaction chimique

Contrôle frontalier (orbitaire) : identification du nucléophile et de l'électrophile, critère de réactivité (règle de Fukui).

Etude orbitaire d'une SN₂, conséquences sur les propriétés de cette réaction.

Etude orbitaire d'une addition nucléophile sur la fonction carbonyle : identification des orbitales frontières de la C=O (seul l'aspect théorique avec les orbitales a été vu comme application du cours sur le contrôle orbitaire).

Chimie organique : les alcènes et les alcools

Présentation – contrôle cinétique et thermodynamique.

Obtention par oxydation des alcools. Oxydation ménagée pour s'arrêter à l'aldéhyde.

Les alcènes : généralités, présentation de la fonction.

Révisions de première année

- **Stéréochimie et conformation du cyclohexane au complet.**
- **Chimie organique : chimie des dérivés halogénés (SN et E) et des alcools (dont Williamson) en entier.**