

<b>CHIMIE THEORIQUE</b>
-------------------------

**Structure électronique de l'atome**

1/ Modèle quantique de l'atome monoélectronique

-Notions de mécanique quantique : opérateurs, équation de Schrodinger

-Fonctions d'onde de l'atome d'hydrogène

-Différentes représentations graphiques d'une orbitale atomique (allure des OA s, p et d)

2/ Étude des atomes poly électroniques

-présentation du modèle de Slater (même si ce n'est pas explicitement au programme) : Calcul de la constante d'écran  $\sigma$  et de la charge effective  $Z^*$ . Calcul de l'énergie totale de l'atome

-configuration électronique d'un atome et de ses ions associés

3/ Classification périodique des éléments

**Structure électronique des molécules**

1/ Principe de la théorie LCAO-OM : étude détaillée de  $H_2^+$  puis  $H_2$  (orbitales liante, antiliante et non liante)

2/ Construction de diagrammes d'OM

-orbitale liante, non liante et antiliante

-orbitales  $\sigma$  et  $\pi$

-influence de l'électronégativité sur la forme des OM

-diagrammes dits « corrélés »

Exemples vus en cours  $O_2$ ,  $N_2$ , HF et LiH

3/ Molécules polyatomiques organiques

Théorie de l'hybridation (même si ce n'est pas explicitement au programme)

Etude de l'éthylène, du méthanal et du butadiène (à partir du déterminant séculaire)

4/ Méthode des orbitales de fragment

-Etude des systèmes  $H_n$  :  $H_4$  plan carré puis linéaire,  $H_3$  linéaire puis triangulaire

-Etude de molécules organiques : méthane, éthylène et cyclobutadiène

*(a priori, on devra savoir construire puis interpréter n'importe quel diagramme des OM à partir du diagramme des orbitales de fragments d'une molécule donnée)*