

CHIMIE THEORIQUE**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 plus au programme) : Calcul de la constante d'écran σ 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 σ et π

-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

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)