

2-L-Liaisons

Intro :

Carte Mentale + niveau historique assez récent

Il existe différents modèles de liaisons atomiques, en fonction de l'énergie de liaison, qui correspond à l'énergie qu'il faut fournir pour casser la liaison.

Penser à dire que pour avoir une liaison parfaitement covalente il faut que les 2 atomes aient la même électronégativité autrement on peut avoir une liaison partiellement ionique avec l'apparition d'un moment dipolaire.

Post Bac :

1) Expliquer la méthode CLAO

Approximation : Une OA n'a qu'une fonction d'onde χ_i

- On ne considère que les électrons de coeurs.

$$-\varphi_i = \sum_j C_{ij} \chi_i$$

- Densité de probabilité $|\varphi_i|^2 = (C_1\chi_1)^2 + (C_2\chi_2)^2 + 2C_1C_2\chi_1\chi_2$ et c'est ça qui a une réalité physique

- l'interaction de n orbitales atomiques engendre la construction de n orbitales moléculaires.

Les dessiner pour les 1s de H et He

2) Diagramme des orbitales moléculaire (H₂, He₂ et O₂)

Calcul des indices de liaison

Parler de O₂ qui est paramagnétique (à l'état liquide il va se coller à l'aimant là où le champ B est le plus fort)
(état liquide car l'agitation thermique à haute température prend le pas sur l'alignement des moments magnétiques)

Questions : On a vu la liaison et parler que pour les molécules plus complexe on utilise la méthode des fragments (avec les symétries ça se fait bien).

Question : l'OA la plus électronégative est plus basse en énergie (voir cours agrég interne Orsay)

Péda : 1^{ère} S

Cohésion dans les solides : liaisons intermoléculaires. (liaisons H et Van der Waals)

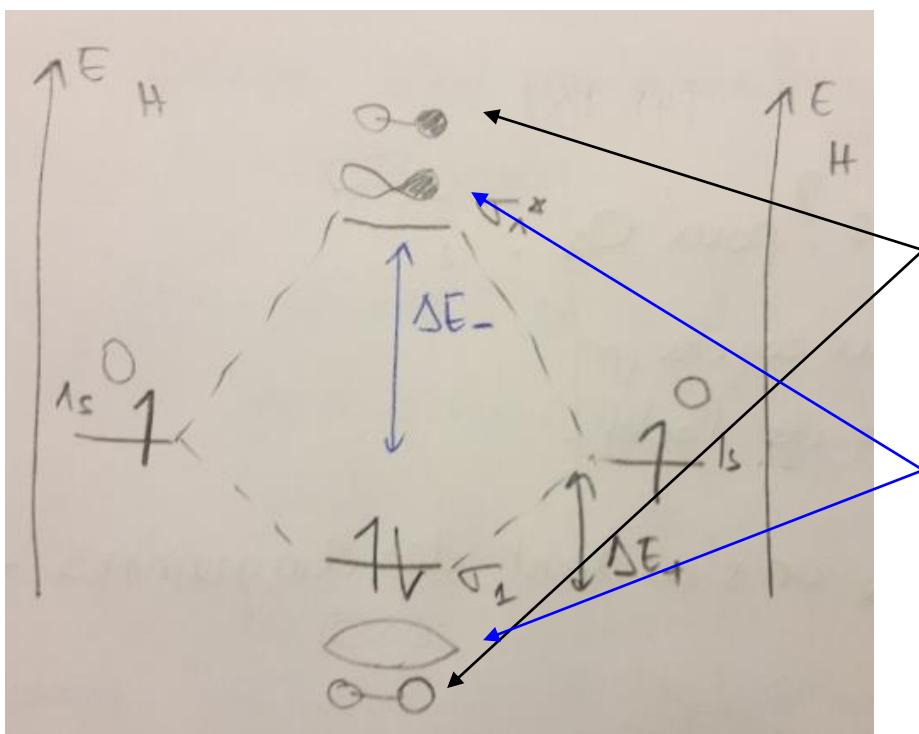
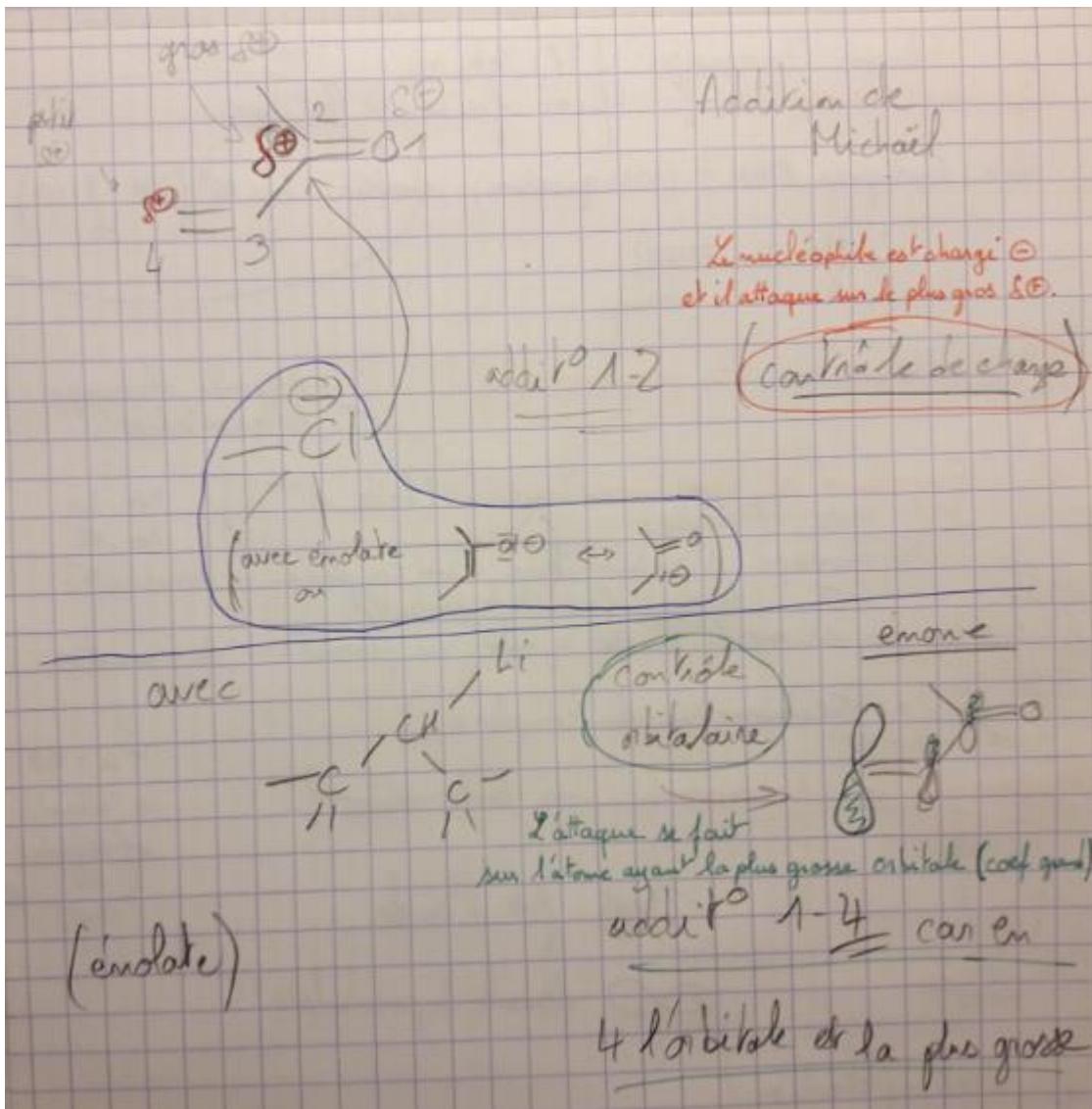
1H en classe entière (par Binome)

Synthèse argumenté (Le monde à ses raisons, Courty et Kierlyk + Hachette éducation et Nathan collection Sirius)

Grille d'autoévaluation

Prévoir un travail maison sur les composés capables de faire des liaisons H (avec le doc qui est dans le j'intègre Saenz) (Le proposer à 2 niveaux)

Conclusion : Pour la réactivité connaître les liaisons est essentiel pour la TS avec les mécanisme réactionnel (représentation de Lewis qu'ils ont vu en 1erS). Et les OM explique bien également la réactivité de certaine réaction notamment l'attaque 1-4 sur une énone



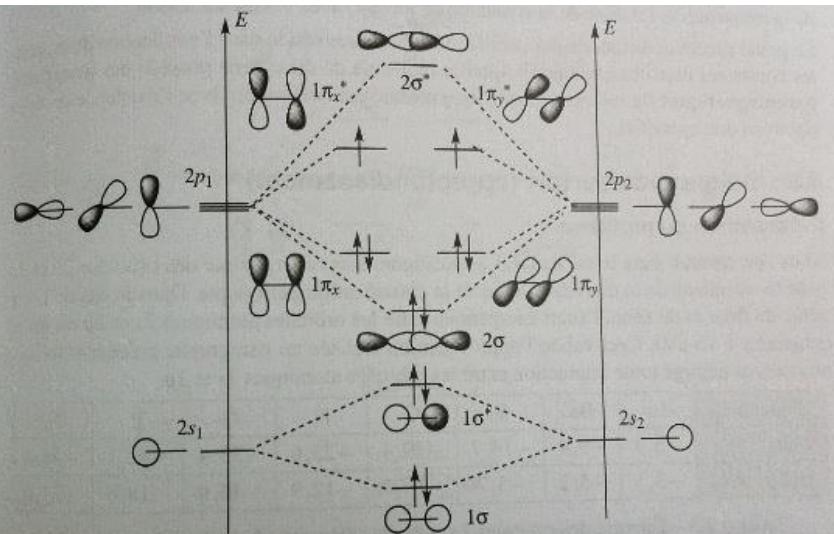
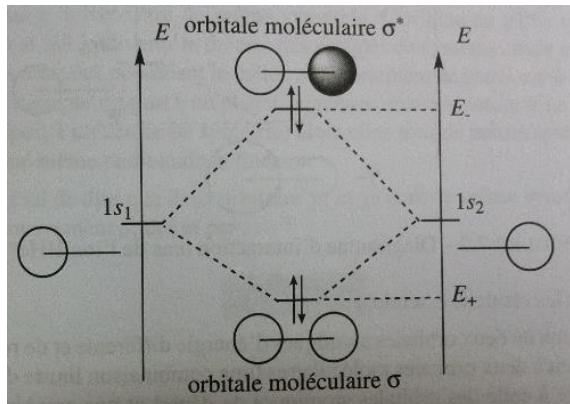
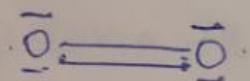


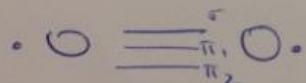
FIGURE 7.12 – Diagramme d'interaction et configuration électronique fondamentale dans le cas du dioxygène

- Comment établir la structure de Lewis pour O₂ ?



voulent saturer leur couche pr
respecter la règle de l'octet .

- Refaire une représentation développée de O₂ en s'a aidant des diagrammes + Lewis .



Non respect de la règle de l'octet .

Quel est le Bon(vrai) modèle ? Représenter le + proche ?

Via les orbitales car expliquent des phénomènes macro .

triplicité des spins? Triplet. $S = \frac{1}{2}, \frac{1}{2} = 1$

②

Parag magnétique est magnétique?
(pas magnétique)

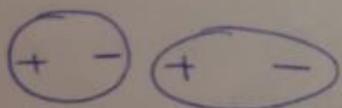
Magnétique a-t-il forcément été célibataire?

Non...
Oui

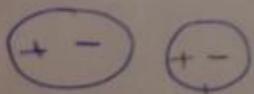
Si e- célibataire, moment magnétique s'aligne avec champ magnétique.

Def paramagnétique? Si e- célibataire.

London? Hückel? Debye?



: Debye ou Hückel? Kissom.



: Debye

a l'approche du collo de gauche
→ polarisé
→ dipôle induit.

London: dipôle instantané ou dipôle induit \rightarrow liaison la + forte.

polarisé-polarisé n'est pas la meilleure car l'orientation des molécules est rarement bonne.

\rightarrow pas alcane en London: $\chi_c + \chi_h$: petite polarisat°.

\rightarrow CH_4 : pas polarisé + un liquide. (100% London)
bouill jusqu'à assez hte T°C.

Ethanol: 48% London + hydrogène.

Preciser définit° liaison σ : liaison des 2 noyaux
Recouvrent des 2 axes

\Rightarrow la densité e- est max sur l'axe.

\Rightarrow si densité pas max sur l'axe $\Rightarrow \pi$

- Compléter les é 1 tous en m tps car les é sont tous indiscernables.
- Ex solide ionique ? Sel
- moléculaire ? saccharose . } vu en 2nde par conductivité électrique

Comment montrer NaCl solide ionique se dissout ? Electrolyse en sel fondu.

- Remplacer glacon benzène ? paraffine

Solvant extracteur, séparat°, liaison ? → Parler de miscibilité ?

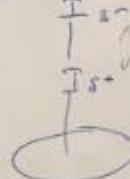
Solvant polaire, pratique ac liaisons H.

Cyclohexane / diiode : apolaire / apolaire : liaison de VDW.

- Diiode + cyclo ? Violet -
- Diiode + benzène ? Rouge

↓
liaisons π
au dessous / en dessous
du cycle .

} couleur due à une transition
cf complexe benzène / diiode.



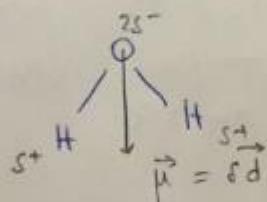
suivant le ligand, pas le m écart entre S⁺ et S⁻
et couleur ≠ (je crois...)
liaison kysom -

- Solide métallique ? Modèle de Drude.

Réseaux de cat° structurés et merc d'e⁻

- Déf moment dipolaire ?

Comment le mesurer ?



conductivité

- Importance des doubles non liants ? Réactivité avec les doubles en TS.

- Liaison covalente / ionique ? = Liaisons qui forment des complexes.
- liant que covalente .

- Pg ECO ? E définie = énergie potentielle, d'où E=0 lorsque e- à l'infini.

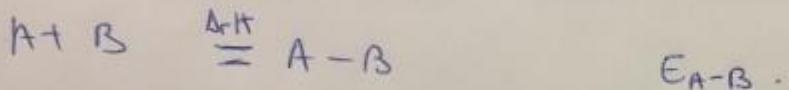
Technique pour mesurer ces E ? Ionisé... Attraper e⁻... photoélectron. on éclaire une molécule (rayons X) et on regarde vitesse des e⁻ éjectés ⇒ Ec, on compare au Energie au départ.

des 15eV si on n'a pas d'ordinateur pour calculer.

expliquer pq e^- de cœur ne peuvent pas intervenir, ~~pas~~ à un lycée?

Modèle de Bohr. e^- de cœur trop proches du noyau.

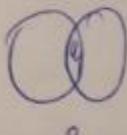
qd on crée une liaison, exoθ.



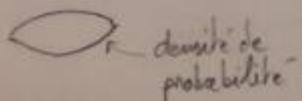
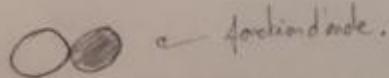
$$E_{A-B}$$

• Que représente le lobe? ~~densité de probabilité~~ Partie réelle de la fⁿ d'onde.

Pas de signe si probabilité de présence ~~absolu~~ d' e^- .

•  Si recouvrement.

$$2c_1c_2 p_1p_2$$



Ancienne version : Intéressante à lire pour les questions

Le modèle de Lewis proposant une vision localisée des électrons (ou délocalisée dans le cadre de la théorie de la mésomérie) apporte dans bien des cas des résultats satisfaisants. Il est cependant incapable de rendre compte de certains faits expérimentaux :

- Comportement paramagnétique du dioxygène.
- Incapacité de prédire la géométrie de la molécule d'éthylène avec la méthode VSEPR.

Nous allons voir les notions de mécanique quantique nécessaires à la description des liaisons chimiques. Dans cette théorie, les particules se comportent tantôt comme des particules, au sens classique du terme, et tantôt comme des ondes. **L'équation de Schrödinger** permet d'accéder aux caractéristiques de ces ondes.

1. Approximation et définition

- Approximation de Born-Oppenheimer : Les noyaux étant beaucoup plus massifs que les électrons, on les considère comme fixe.
- Monoélectronique : chaque électron de la molécule est traité indépendamment des autres.

Chaque électron d'une molécule est décrit par une fonction d'onde que l'on appelle une orbitale moléculaire (OM) et que l'on note : φ_i

Chaque électron centré sur son atome est décrit par une fonction d'onde que l'on appelle orbitale atomique (OA) et que l'on note χ_i

2. Méthode CLAO (Combinaison Linéaire d'Orbitale Atomique)

Cette méthode est une approximation qui consiste à dire qu'une orbitale moléculaire est une combinaison linéaire d'orbitale atomique :

$$\varphi_i = \sum_j C_{ij} \chi_i$$

Cela peut paraître laborieux avec des atomes qui ont beaucoup d'orbitales atomiques, mais on va faire une approximation supplémentaire en ne prenant en compte seule les OA de valence.

Si on considère la molécule de H_2 (la plus simple) on obtient alors :

$$\varphi = c_1 \chi_1 + c_2 \chi_2$$

Dans ce cas nous dirons que les 2 OA χ_1 et χ_2 interagissent pour conduire à des orbitales moléculaires

Ces OM sont solution de l'équation de Schrödinger : $\hat{H}\varphi = \varepsilon\varphi$

Avec \hat{H} : opérateur hamiltonien monoélectronique et ε : l'énergie de l'orbitale moléculaire

L'opérateur hamiltonien étant linéaire on peut multiplier à gauche et à droite par φ et développer tout ça :

$$\hat{H}(c_1 \chi_1 + c_2 \chi_2)^2 = \varepsilon(c_1 \chi_1 + c_2 \chi_2)^2$$

$$c_1^2 \chi_1 \hat{H} \chi_1 + c_2^2 \chi_2 \hat{H} \chi_2 + 2c_1 c_2 \chi_1 \hat{H} \chi_2 = \varepsilon(c_1^2 \chi_1 \chi_1 + c_2^2 \chi_2 \chi_2 + 2c_1 c_2 \chi_1 \chi_2)$$

On intègre tout ça sur le volume et on adopte une écriture simplifiée

$$\alpha_i = \iiint_{volume} \chi_i \hat{H} \chi_i d\tau : \text{intégrale coulombienne}$$

$$\beta_{ij} = \iiint_{volume} \chi_i \hat{H} \chi_j d\tau : \text{intégrale de résonnance (avec } i \neq j)$$

$$S_{ij} = \iiint_{volume} \chi_i \chi_j d\tau : \text{intégrale de recouvrement (avec } i \neq j)$$

Si $S_{ii} = S_{jj} = 1$ à cause de la condition de normalisation qui nous dit qu'on trouve bien une OA sur le volume autour de l'atome

α est l'intégrale coulombienne (< 0). Elle représente l'énergie d'un électron dans une orbitale atomique (OA) p . Elle ne dépend que de l'atome i . Sa valeur diminue lorsque l'électronegativité ~~augmente~~ de l'élément.

β est l'intégrale de résonnance (< 0). Elle représente l'énergie d'interaction entre les orbitales p des atomes i et j . (C'est une loi croissante de S_{ij} .

S_{ij} est l'intégrale de recouvrement.

Les deux atomes (1 et 2) étant identiques, on peut simplifier l'écriture

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha \quad \text{et} \quad \beta_{12} = \beta_{21} = \beta \quad \text{et} \quad S_{12} = S_{21} = S$$

On obtient alors :

$$c_1^2 \alpha_1 + c_2^2 \alpha_2 + 2c_1 c_2 \beta_{12} = \varepsilon(c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 S_{12})$$

Les valeurs de l'énergie et des coefficients sont déterminés en postulant que les valeurs de coefficients sont celles qui minimisent l'énergie de l'OM : soit $\frac{\partial E}{\partial c_1} = \frac{\partial E}{\partial c_2} = 0$

On obtient alors un système de 2 équations à 3 inconnus :

$$\begin{cases} (\alpha - \varepsilon)c_1 + (\beta - \varepsilon S)c_2 = 0 \\ (\beta - \varepsilon S)c_1 + (\alpha - \varepsilon)c_2 = 0 \end{cases}$$

Pour avoir une solution non triviale qui consisterait à avoir $c_1 = c_2 = 0$ il faut que le déterminant séculaire de la matrice ci-dessous soit nul :

$$\begin{vmatrix} \alpha - \varepsilon & \beta - \varepsilon S \\ \beta - \varepsilon S & \alpha - \varepsilon \end{vmatrix} = 0$$

Math: Déterminant d'une matrice.

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} \Rightarrow D = ad - cb$$

On obtient alors $(\alpha - \varepsilon)^2 - (\beta - \varepsilon S)^2 = 0$ qui nous donne une équation du 2nd degrés en ε dont les solutions sont d'après le livre:

$$\varepsilon_1 = \frac{\alpha + \beta}{1 + S} \quad \text{et} \quad \varepsilon_2 = \frac{\alpha - \beta}{1 + S}$$

Mais pour moi il y a une erreur.

$$\begin{aligned} (\alpha - \varepsilon - \beta + \varepsilon S)(\alpha - \varepsilon + \beta - \varepsilon S) &= 0 \\ (\varepsilon(S-1) + \alpha - \beta)(\varepsilon(-S+1) + \alpha + \beta) &= 0 \\ \Downarrow & \\ \boxed{\varepsilon = \frac{\alpha - \beta}{1 - S}} & \quad \boxed{\varepsilon = \frac{\alpha + \beta}{1 + S}} \end{aligned}$$

$$(\alpha - \varepsilon)^2 - (\beta - \varepsilon S)^2 = 0 \quad \text{math: } a^2 - b^2 = (a - b)(a + b)$$

d'où $((\alpha - \varepsilon - \beta + \varepsilon S)(\alpha - \varepsilon + \beta - \varepsilon S)) = 0$

$$\varepsilon_1 = \frac{\alpha + \beta}{1 + S} \quad \text{et} \quad \varepsilon_2 = \frac{\alpha - \beta}{1 - S}$$

On voit bien ici que l'interaction de deux orbitale atomique engendre la construction de 2 orbitales moléculaires. Ce résultat peut être généralisé : l'interaction de n orbitales atomiques engendre la construction de n orbitales moléculaires.

Pas le temps de le faire le jour de l'oral

Pour trouver les valeurs analytiques de C1 et C2 il faut réinjecter les valeurs de ε_1 et ε_2 dans une de ces 2 équations

$$\begin{aligned} (\alpha - \varepsilon)c_1 + (\beta - \varepsilon S)c_2 &= 0 \\ (\beta - \varepsilon S)c_1 + (\alpha - \varepsilon)c_2 &= 0 \end{aligned}$$

Avec ε_1 on va trouver $c_1 = c_2$

Avec ε_2 on va trouver $c_1 = -c_2$ puis on utilise la condition de normalisation

$$\Rightarrow \boxed{c_1 = c_2}.$$

Condition de normalisation (normalisation) $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ ($\int \Psi^* \Psi d\zeta = 1$) on trouve l'écart entre l'OM et l'autre de l'OM forcément.

$$\Rightarrow \langle c_1 X_1 + c_2 X_2 | c_1 X_1 + c_2 X_2 \rangle = (c_1 X_1 + c_2 X_2)^2 \leftarrow \text{déjà calculé.}$$

$$\cancel{\int_{\text{volume}} d\zeta} \rightarrow (\underbrace{c_1^2 \cancel{\int_{\text{volume}} X_1 X_1 d\zeta}}_1 + \underbrace{c_2^2 \cancel{\int_{\text{volume}} X_2 X_2 d\zeta}}_1 + 2c_1 c_2 S_{12}) = 1$$

$$\Rightarrow \left. \begin{array}{l} c_1^2 + c_2^2 + 2c_1 c_2 S = 1 \\ \text{avec } c_1 = c_2 = c \end{array} \right\} \Rightarrow 2c^2 + 2c^2 S = 1 \Rightarrow \boxed{c_1 = c_2 = \frac{1}{2\sqrt{1+S}}}$$

Si on fait de même avec E_2 on trouve $c_1 = -c_2 = \frac{1}{2\sqrt{1-S}}$.

Les 2 OM s'écrivent alors : $\Psi = c_1 X_1 + c_2 X_2$

$$\Rightarrow \boxed{\Psi_1 = \frac{1}{2\sqrt{1+S}} (X_1 + X_2)}$$

liante de plus basse énergie

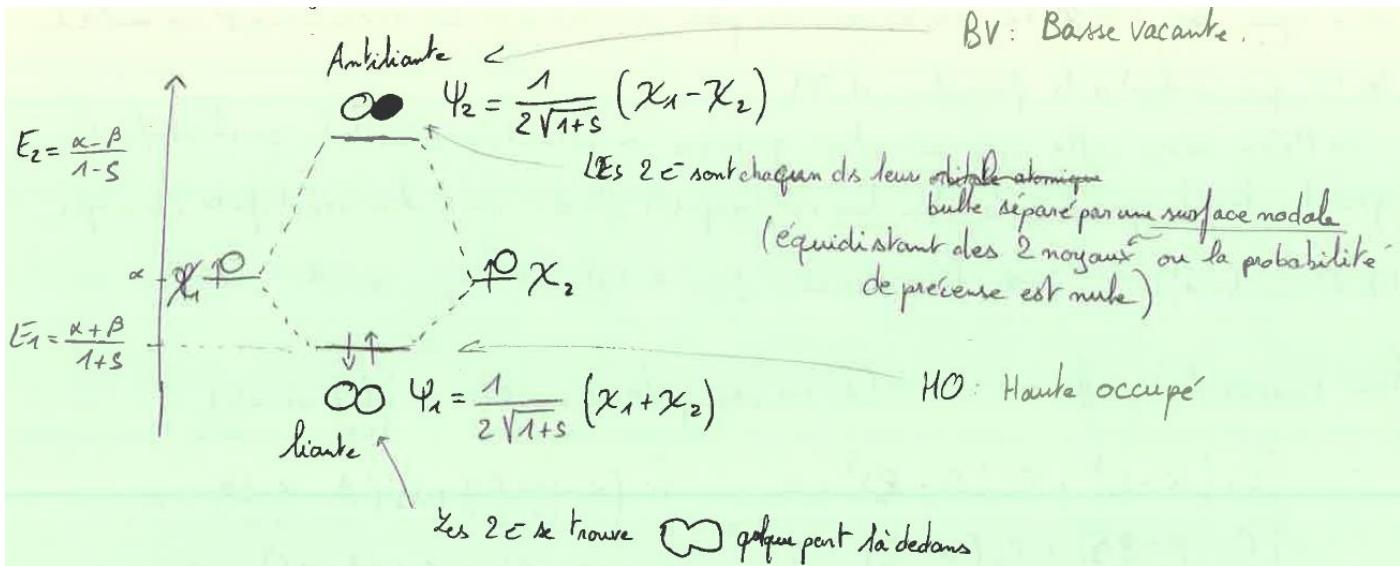
$$\text{et } \boxed{\Psi_2 = \frac{1}{2\sqrt{1-S}} (X_1 - X_2)}$$

antiliante de plus haute énergie.

Le remplissage des orbitales moléculaires du diagramme s'effectue selon les trois règles suivantes :

- La règle de Klechkowski : on remplit en premier les orbitales de plus basses énergie avant de remplir les orbitales d'énergies supérieures
- Le principe d'exclusion de Pauli : une orbitale moléculaire ne peut contenir au maximum que deux électrons, ceux-ci possédant des spins opposés
- La règle de Hund : lors du remplissage de plusieurs OM de même énergie, on met d'abord un électron dans chaque orbitale, avec le même spin pour chacun, avant de mettre deux électrons de spins opposés dans la même orbitale.

Diagramme d'interaction, cas de H₂



Explication du diagramme : A faire absolument

D'après la définition de l'intégrale coulombienne α correspond à l'énergie des OA 1S de H

α est l'intégrale coulombienne ($<\alpha$). Elle représente l'énergie d'un électron dans une orbitale atomique (OA) p. Elle ne dépend que de l'atome i. Sa valeur diminue lorsque l'électronegativité augmente de l'élément.

- comme $\alpha < 0$ et $\beta < 0$ et que S (sans dimension) prend des valeurs entre 0 et 1 en valeur absolue on a donc $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$
- Si on regarde bien l'orbitale moléculaire liante est moins stabilisé ($\Delta E_- = \alpha - \varepsilon_1$) que l'orbitale moléculaire anti-liante est déstabilisée ($\Delta E_+ = \varepsilon_2 - \alpha$)
- L'écart énergétique est fonction du recouvrement S. Un faible recouvrement n'occasionne qu'une faible évolution de l'énergie des orbitales tandis qu'un recouvrement important provoque une forte valeur de ΔE_+ et ΔE_-

3. Interprétation (H₂, He₂ et enfin O₂) stabilité et paramagnétisme

Ce diagramme servira à connaître la stabilité des molécules et la possibilité ou non de réaction.

Cas H_2 et He_2

Pour H_2 : E_I initiale correspond à 2 at d' H séparée: $E_I = 2\alpha = 2E_H$

E_F est une molécule de H_2 : $E_F = E_{H_2} = 2E_1 + \alpha E_2 = 2\left(\frac{\alpha+\beta}{1+s}\right) = 2E_1$

$$\Rightarrow E_F - E_I = 2E_1 - 2\alpha = 2(E_1 - \alpha) < 0 \text{ donc stable } E_F < E_I$$

Pour He : E_I : 2 at d' He avec $2e^-$ chacun: $E_I = 4\alpha = 4E_{He}$

$$E_F: E_F = E_{He_2} = 2E_1 + 2E_2$$

$$\Rightarrow E_F - E_I = 2(E_1 - \alpha) + 2(E_2 + \alpha) > 0 \text{ donc instable.}$$

L'indice de liaison correspond au nombre de liaison entre les atomes (un indice de liaison de 2 correspond par exemple à une double liaison). Pour qu'une liaison soit stable, il faut que l'indice de liaison soit strictement positif. Si l'indice de liaison est négatif ou nul, la liaison chimique est instable et tend à se rompre.

$$\text{Indice de liaison} = \frac{(\text{Nb d'électrons dans des OM liantes}) - (\text{Nb d'électrons dans des OM antiliantes})}{2}$$

Pour He_2 l'indice de liaison est nul donc la liaison chimique est instable

Pour H_2 l'indice de liaison = 1 donc on va avoir une liaison stable.

Construire le diagramme du dioxygène en utilisant la symétrie : pour simplifier les choses

La symétrie permet d'énormément simplifier les problèmes. En effet, on peut montrer que si 2 orbitales ont des symétries différentes, leur intégrale de recouvrement

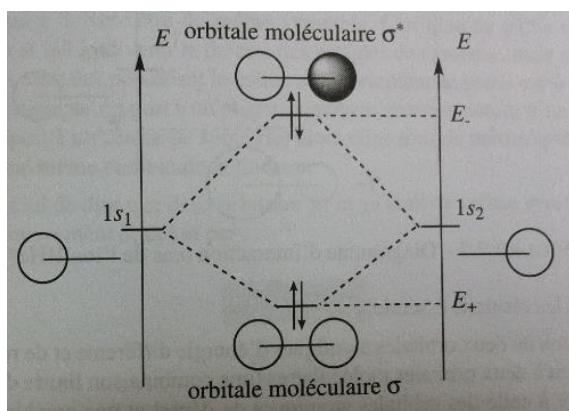


Diagramme d'interaction du dihélium

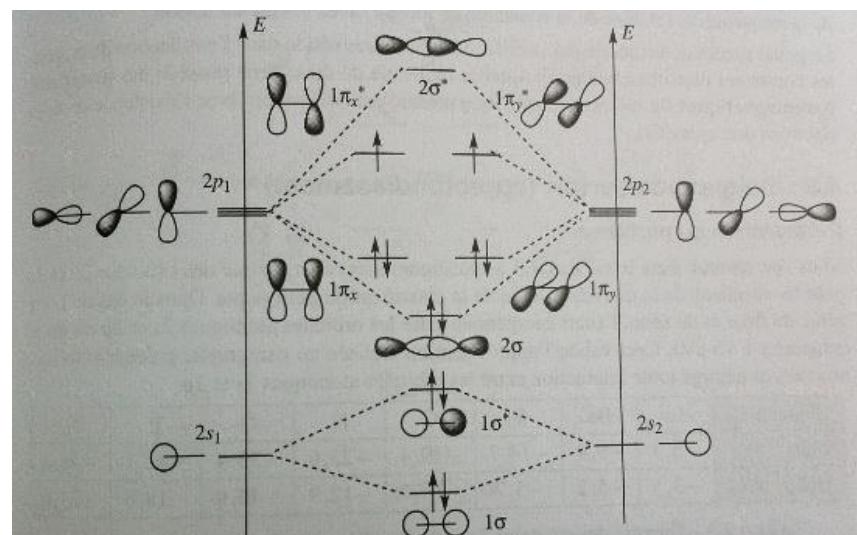


FIGURE 7.12 – Diagramme d'interaction et configuration électronique fondamentale dans le cas du dioxygène

On observe sur le diagramme du dioxygène la présence de 2 électrons non appariés ce qui indique que la molécule est paramagnétique. Le grand succès de cette théorie des orbitales moléculaires réside en partie dans le fait qu'elle explique ce que l'on constate expérimentalement et qui ne pouvait expliquer la méthode de Lewis.

Question : Peut-on interpréter la représentation de Lewis de O₂ avec ce diagramme ? Et si oui comment ?

Je crois qu'il faut calculer l'indice de liaison : pour O₂ Indice de liaison = $\frac{8-4}{2} = 2$ double liaison

Remarque : Paramagnétisme / diamagnétisme

Un électron est une charge qui tourne sur elle même (cette rotation est liée au spin) donc c'est un petit aimant.

- Les électrons sont appariés lorsqu'ils sont deux dans une case quantique et les spins sont opposés donc le doublet ne se comporte pas comme un aimant

- Une substance formée de molécules n'ayant pas d'électrons célibataires est diamagnétique. Placée dans un champ magnétique le mouvement des électrons y est perturbé et il s'y crée une petite aimantation induite opposée au champ appliqué

- Une substance qui a un ou plusieurs électrons célibataires est paramagnétique : placée dans un champ magnétique il va y avoir une petite aimantation induite comme dans la substance diamagnétique mais il va y avoir un nouveau phénomène : les petits aimants (électrons célibataires) vont avoir tendance à s'orienter et il se crée une aimantation dans le sens du champ.

Explication du diagramme du dioxygène :

L'orbitale 2σ est plus stabilisée que les orbitales 1π_x et 1π_y (alors que se sont toutes les trois des combinaisons d'orbitales 2p) et de la même façon l'orbitale 2σ* est plus déstabilisée que les orbitales 1π_x* et 1π_y*. Cela est du au fait qu'un faible recouvrement n'occasionne qu'une faible évolution de l'énergie des orbitales moléculaires par rapport aux orbitales atomiques de départ tandis qu'un recouvrement important provoque une forte valeur de l'éclatement des niveaux d'énergie en niveau liant et antiliant. Un recouvrement axial, ayant lieu le long de l'axe internucléaire et provoquant l'apparition d'une orbitale moléculaire de symétrie σ, est plus important qu'un recouvrement latéral conduisant à des orbitales moléculaires de symétrie π

Liaisons σ : lorsqu'on a un recouvrement axial

Liaison π : lorsqu'on a un recouvrement latéral

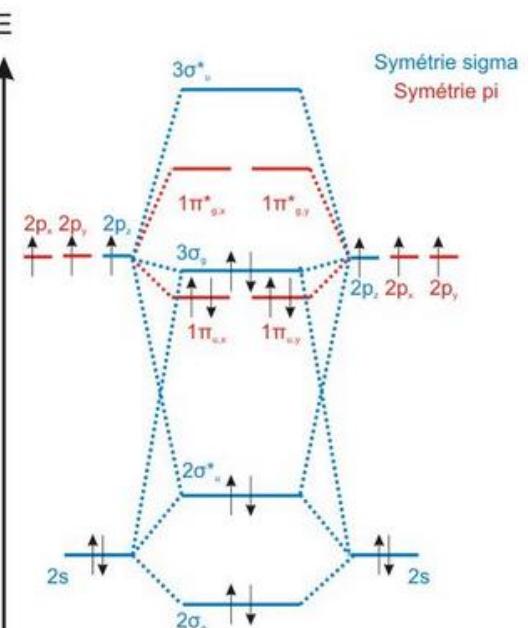
Rémarque :

Pour N₂ on va avoir un diagramme corrélé car la 2S et 2Pz vont pouvoir interagir du fait qu'elles ont une faible différence d'énergie et donc le diagramme va changer vis-à-vis de celui du dioxygène.

$$\text{Indice de liaison} = \frac{8 - 2}{2} = 3 \quad \text{triple liaison}$$

Le changement le plus notable qui apparaît dans les diagrammes corrélés correspond à la déstabilisation de l'OM 3σ_g formée par l'interaction des OA p_z, qui entraîne une inversion des niveaux d'énergie des OM σ_g et π_u.

D'après ce diagramme corrélé c'est surtout les liaisons π qui sont liées car elles ont une énergie plus basse que la 3σ_g liante



Idée de plan sans calcul

Expliquer la méthode CLAO et l'appliquer pour H₂ et He (instable)

Faire la même mais avec O₂, mais en utilisant les symétries (double liaison) et dire qu'on retrouve LEWIS mais qu'en plus on explique diamagnétisme

(Garder N2 et diagramme corrélé en question).

Conclusion : On a vu la liaison et parler que pour les molécules plus complexe on utilise la méthode des fragments (avec les symétrie ça se fait bien), parler(vaguement ou pas du tout) de Huckel simple et Huckel étendu qui utilise la théorie des groupes

Question : l'OA la plus électronégative est plus basse en énergie (voir cour agreg interne Orsay)

Conclusion :

Modèle de Huckel simple pour prédire réactivité de la double liaison (réaction de Diels Alder)

Dans la méthode de Huckel simple on fait une grosse approximation en prenant $S=0$ ce qui veut dire que les 2 OA ne se recouvre pas, or c'est ce recouvrement qui permet d'obtenir une OM, mais même avec cette approximation grossière on obtient de bon résultat qualitatif.

Péda : 1^{ère} S (fin de la partie couleur et image dans le BO)

Isomérie Z/E (formule de Lewis)

Activité préparatoire (A la maison) géométrie des molécules (règle du duet et Octet + représentation de Lewis)

Activité en classe :

- A- intérêt d'une nouvelle représentation des molécules
- B- Modélisation des molécules dans l'espace (Logiciel Chemsketch qui a l'avantage d'être gratuit)
- C- Représentation dans l'espace des molécules : Modèle moléculaire.

Question :

- 1) Le modèle de Huckel tel que présenté (simple) s'applique-t-il à tout type de molécule ?
- 2) CLOA et Huckel sont-ils différents et en quoi ? Les delta d'énergie entre la σ et σ^* est le même pour huckel alors qu'il est plus grand pour σ^* en CLAO

Jury :Le modèle présenté est celui de huckel simple qui s'applique qu'a des liaisons doubles.

- 3) Dans les démos de Huckel simple tout les H_{ij} sont égaux pk ?
- 4) Quelle approximation a fait Huckel ?
- 5) Qu'est ce que modélisent tout les β égaux dans la matrice ? « délocalisation »
- 6) On s'arrête au diagramme d'énergie, mais finalement à quoi ça sert ? lorqu'on s'intéressent au Orbital frontière c'est très important.

Jury : Ethène est un bon exemple (mais je n'ai pas compris pourquoi)

Si on fait CLOA on retombe sur le modèle de Huckel et c'est en ça que Huckel est fort. Il fait une approximation osée $S_{ii}=S_{jj}=0$ ou $S_{ij}=S_{ji}=0$ (je suis pas sur de moi)

Le fait que $S_{ij}=S_{ji}=0$ comment ça se représente ?

- 7) Méthode de Huckel pour $C=O$?
- 8) Peut-on déterminer les coefs C_1 et C_2 dans le cas de l'éthène ?
- 9) Quelle est la différence entre l'isomérie cis/trans et Z/E ?
- 10) est ce que la molécule CH_2Br_2 est polaire ? oui car elle forme un tétraèdre.
- 11) A quel niveau se situe les liaisons hydrogène dans l'ADN ?
- 12) Que veut dire ADN ? **Acide désoxyribonucléique**
- 13) NaCl est formé de liaison ionique ? pouvez-vous préciser ?

14) Qu'est ce qu'il ya dans le sel en lui-même ? qu'elle est la structure de NaCl ? Représenter la maille

Question péda :

Programme représenter sous forme de colonne, pourquoi ?

Les programmes de lycée ont été complété il y a un ans « repère sur la formation »

Pourquoi parler de couleur dans les programmes ? Pour relier 2 mondes, l'optique et la chimie

Avez-vous regarder les questions posés au bac ? (Ce sont des questions larges)