



Quinzaine 7 : 20 janvier – 1^{er} février

Modélisation quantique (PC)

COURS/EXERCICE PROCHE DU COURS

- **Orbitales atomiques**
 - Énoncer les règles de l'aufbau et les règles de quantification des nombres quantiques.
 - Écrire la configuration électronique d'un atome ou d'un ion à l'état fondamental.
 - Identifier les électrons de valence dans une configuration, ainsi que le nombre d'électrons célibataires.
 - Relier la configuration électronique et la position dans la classification périodique.
 - Établir l'expression d'une densité radiale de probabilité de présence et l'étudier.
 - Analyser une courbe de densité radiale de probabilité de présence.
 - Définir et déterminer le rayon d'une OA à partir de l'expression fournie de la fonction d'onde.
 - Vérifier le caractère normé d'une OA.
 - Nommer et représenter les formes des OA s, p et d.
 - Citer et justifier l'évolution des grandeurs suivantes dans la classification périodique : charge effective d'un électron de valence, rayon atomique, énergie des OA de valence, électronégativité, polarisabilité.
 - Exprimer l'énergie d'un électron dans un système hydrogénoïde.
 - Associer une longueur d'onde et l'énergie d'une transition électronique.
 - Définir et calculer une énergie d'ionisation pour un système hydrogénoïde.
 - Utiliser le modèle de Slater (son principe devra être rappelé par l'examineur).
- **Interaction de deux OA**
 - Présenter les règles nécessaires à la combinaison de deux OA,
 - Identifier des orbitales orthogonales à partir de leurs représentations.
 - Établir le diagramme d'OM relatif à la combinaison de deux OA (niveaux d'énergie et représentation conventionnelle des OM en tenant compte d'une éventuelle dissymétrie).
 - Utiliser la condition de normalisation pour déterminer les coefficients d'une combinaison linéaire de deux OA identiques.
 - Associer une courbe d'isodensité à une représentation conventionnelle d'OM.
 - Identifier le caractère liant/non-liant/anti-liant d'une OM.
 - Identifier la nature σ ou π d'une OM.
 - Établir ou interpréter le diagramme d'OM d'un édifice diatomique symétrique A_2 ou dissymétrique AB (diagramme simple ou corrélé).
 - Décrire l'occupation des niveaux d'énergie.
 - Calculer l'indice de liaison d'une entité diatomique et interpréter l'évolution de la longueur de liaison ou
 - Comparer les prévisions du modèle des OM et du modèle de Lewis.

Cinétique chimique en réacteur fermé (PCSI)

EXERCICES

- Intégrer l'équation différentielle associée à une loi de vitesse simple à ordre entier.
- Utiliser la méthode différentielle ou la méthode intégrale pour déterminer un ordre partiel.
- Utiliser la dégénérescence de l'ordre ou le travail en proportions stœchiométriques pour simplifier une loi de vitesse.
- Identifier les situations permettant d'utiliser les approximations de l'étape cinétiquement déterminante, du pré-équilibre rapide et d'un état quasi-stationnaire.
- Établir une loi de vitesse à partir d'un mécanisme réactionnel.
- Choisir et utiliser les résultats issus d'une méthode de suivi temporel d'une transformation chimique (concentration, absorbance, pression, conductivité, etc.) pour déterminer une loi de vitesse.

- Représenter une maille conventionnelle.
- Déterminer une population, une coordinence, une compacité, une masse volumique à partir de la description d'une maille.
- Positionner et dénombrer les sites interstitiels octaédriques et tétraédriques dans une maille cubique à faces centrées. Déterminer leur habitabilité.
- Justifier la stabilité d'un cristal ionique par l'analyse des conditions de tangence ou non-tangence.