

---

## LC 2

### LIAISONS INTRA- ET INTERMOLÉCULAIRES

(théorie de la liaison intramoléculaire, liaisons intermoléculaires, structures moléculaires)

---

#### Sujets possibles :

##### MODÈLES DE LA LIAISON COVALENTE

###### E.I. Théorie des orbitales moléculaires

- I - Construction des orbitales moléculaires
  - 1) Approximations fondamentales
  - 2) Expression des OM : théorie CLOA
  - 3) Exemple de construction :  $H_2^+$
- II - Étude de molécules diatomiques homonucléaires  $A_2$ 
  - 1) Caractérisation d'une liaison
  - 2) Molécules diatomiques de la 1ère période
  - 3) Molécules diatomiques de la 2ème période

##### INTERACTIONS ENTRE ENTITÉS CHIMIQUES

###### E.I. Interprétation des propriétés physico-chimiques

- I - Interactions de Van der Waals
  - 1) Mise en évidence expérimentale
  - 2) Nature des forces de Van der Waals
    - (a) Deux dipôles permanents : Keesom
    - (b) Dipôle permanent/dipôle induit : Debye
    - (c) Deux dipôles instantanés : London
  - 3) Profil énergétique (*forces attractives ET répulsives*)
- II - Liaisons hydrogène
  - 1) Mise en évidence expérimentale
  - 2) Description de la liaison hydrogène
  - 3) Liaisons hydrogène dans le vivant (*ou ouverture*)

##### SYSTÈMES CONJUGUÉS

###### E.I. Modèle de Hückel

- I - La méthode de Hückel
  - 1) Premices : le déterminant séculaire
  - 2) Approximations de Hückel simple
  - 3) Vers un modèle plus complexe et la paramétrisation d'hétéroatomes
- II - Applications de la méthode de Hückel à quelques systèmes conjugués
  - 1) Éthylène
  - 2) Butadiène
  - 3) Acroléine

##### LIAISON COVALENTE

###### E.I. Comparaison des théories de la liaison de valence et des orbitales moléculaires

- I - La théorie de la liaison de valence
  - 1) Rappels (*règles de l'octet/duet, formule de Lewis*)
  - 2) Première limitation : vers un nécessaire déplacement des électrons (*formes mésomères*)
  - 3) Deuxième limitation : la représentation des molécules dans l'espace (*VSEPR*)
- II - La théorie des orbitales moléculaires
  - 1) Construction des orbitales moléculaires : approximations fondamentales

- 2) Expression des OM : théorie CLOA
- 3) Exemple de construction :  $H_2^+$