

Liaisons chimiques - Compétences (CHIM504_CHIM_SAE)



En bref

- > **Langues d'enseignement:** Français
- > **Méthodes d'enseignement:** En présence
- > **Forme d'enseignement :** Situation d'apprentissage et d'évaluation
- > **Ouvert aux étudiants en échange:** Oui

Présentation

Description

Bases de chimie quantique nécessaires à la représentation mentale de l'atome et à l'élaboration de la liaison chimique entre atomes permettant de construire des molécules. La chimie quantique permet d'aborder à la fois des aspects qualitatif et quantitatif des molécules pour but final de mieux prédire la réactivité chimique.

Objectifs

Comprendre les différents modèles quantiques au niveau de l'atome et des molécules et des approximations fondamentales faites pour simplifier ces modèles. Les interactions entre orbitales atomiques sont abordées pour l'élaboration de nouvelles orbitales moléculaires pour des édifices chimiques de complexité croissante. La construction des diagrammes d'énergie est abordée de manière qualitative à l'aide de la méthode des fragments puis de manière quantitative avec la méthode de Hückel. L'étude de la réactivité chimique est examinée au regard des diagrammes d'énergie des réactifs à des fins de prévision. Une approche moderne de la chimie quantique est finalement abordée, permettant de visualiser l'aspect modélisation moléculaire.

Heures d'enseignement

CM	Cours Magistral	27h
TD	Travaux Dirigés	27h

Pré-requis obligatoires

Atomes et molécules (CHIM101_MPC) de L1, semestre 1

Plan du cours

Historique:

Description quantique des atomes:

1. Rappels de mécanique quantique
2. L'atome d'hydrogène
3. Les atomes hydrogénoïdes
4. Les atomes polyélectroniques

III. Description quantique des molécules:

1. Première approche
2. Les approximations fondamentales
3. L'ion moléculaire H_2^+
4. La molécule H_2

IV. Interactions des OA, les molécules diatomiques:

1. Interactions de 2 OA
2. Éléments de symétrie moléculaire
3. Interactions de 3 OA: molécule AH
4. Étude de molécule diatomique

V. La méthode des fragments:

1. Exemple de systèmes simples

2. Les molécules AH_3 et AH_4

3. Les hydrocarbures, alcanes, alcènes, alcynes

VI. La méthode de Hückel:

1. Principe de la méthode

2. Système p de l'éthylène

VII. Étude de réactivité : réaction de cycloaddition

VIII. Approche des méthodes Ab-initio

Compétences visées

- Être capable de construire un édifice moléculaire et de prévoir les interactions entre orbitales atomiques pour obtenir les orbitales moléculaires.
- Construire des diagrammes d'énergies de molécules simples et complexes.
- Appréhender la réactivité chimique par l'utilisation des diagrammes d'énergie.

Bibliographie

J-L. Rivail (1994) Éléments de chimie quantique à l'usage des chimistes.

Yves Jean et François Volatron (2003) Structure électronique des molécules - Tome 1, De l'atome aux molécules simples - Tome 2, Géométrie, réactivité et méthode de Hückel.

Peter William Atkins, Julio De Paula (2013) Chimie générale.

Libellé court : CHIM504_CHIM_SAE

Nature : MODL

Infos pratiques

Lieux

> Le Bourget-du-Lac (73)

Campus

› Le Bourget-du-Lac / campus Savoie Technolac

Contacts

Responsable du cours

Bernard David

☎ +33 4 79 75 88 03

✉ Bernard.David@univ-savoie.fr