



Atomistique & réactivité



ECTS
crédits



Composante
Faculté des
Sciences

En bref

➤ Ouvert aux étudiants en échange: Non

Présentation

Description

La première partie de cet enseignement présente les bases de la chimie quantique pour les chimistes et les physico-chimistes. Il commence par reprendre les principes de la mécanique quantique et sont équation maître qu'est l'équation de Schrödinger. La résolution de l'équation de Schrödinger dans des cas simples et les notions de fonctions d'onde, de quantification sont présentées et illustrés dans des cas simples. L'atome d'hydrogène est alors étudié.

L'enseignement se penche aussi sur les méthodes d'approximations qui permettent de déterminer les propriétés de systèmes complexes où l'équation de Schrödinger ne peut pas être résolue directement. L'effet du spin sur les propriétés électroniques des atomes et molécules sera aussi abordé.

La seconde partie de cet enseignement s'intéresse à la description quantique des propriétés moléculaires et de la réactivité. La construction qualitative des orbitales moléculaires en utilisant les propriétés de symétrie sera introduite et le lien entre diagramme d'orbitale moléculaire et liaison chimique est fait. Le lien entre géométrie moléculaire et structure électronique sera abordé. Cet enseignement s'intéressera ensuite à la méthode d'Huckel

qui permet d'obtenir des diagrammes d'orbitales moléculaires des systèmes $\#$. Les notions classiques de conjugaison, délocalisation, de caractère donneur ou accepteur et d'aromaticité seront ainsi étudié dans cette approche. La théorie des orbitales frontières est utilisée pour rationaliser la réactivité moléculaires (cycloadditions, électrocyclisation) et les géométries moléculaires.

Infos pratiques

Contacts

Responsable pédagogique

Jean-sebastien FILHOL

✉ jean-sebastien.filhol@umontpellier.fr