

Chimie quantique et liaisons chimiques

Niveau d'étude
Bac +3

ECTS
6 crédits

Composante
**Sciences Fondamentales
et Appliquées**

Période de l'année
Semestre 6

Présentation

Description

Cet enseignement s'articule autour des points suivants :

Des atomes aux molécules : rappel des modèles classiques

Modèle quantique de l'atome

Approximations fondamentales en chimie quantique et théorie des orbitales moléculaires - méthode des fragments, notions de symétrie

Molécules diatomiques systèmes modèles H_n et diagramme de corrélation (Walsh)

Structures électroniques des systèmes AH_x et applications.

Modèles de réactivité en chimie organique

Théorie du champ cristallin et complexes de métaux de transition . Infographie et modélisation (2 TP : Huckel et calculs semi-empiriques)

Objectifs

Rationalisation de la structure géométrique et électronique d'espèces moléculaires à l'aide des modèles classiques (ex. théorie de Lewis, règles VSEPR).

Fondements de la chimie quantique.

Présentation du modèle quantique de l'atome.



Compréhension de la matière à l'état moléculaire à l'aide de la théorie des orbitales moléculaires.

Applications par la méthode de fragments.

Analyse des propriétés structurales et électroniques des complexes de métaux de transition et théorie du champ cristallin.

Heures d'enseignement

TP	TP	6h
TD	TD	16h
CM	CM	28h

Infos pratiques

Contacts

Responsable pédagogique

Gilles Frapper

+33 5 49 45 35 74

gilles.frapper@univ-poitiers.fr

Lieu(x)

Poitiers-Campus