Chimie théorique et modélisation en Sciences Moléculaires

Niveau d'étude	ECTS	Composante	Période de l'année
Bac +4	**6 crédits**	**Sciences Fondamentales et Appliquées**	**Semestre 2**

En bref

Langue(s) d'enseignement: Français

Ouvert aux étudiants en échange: Oui

Présentation

Description

Théorie des orbitales moléculaires appliquée à la chimie inorganique et organométallique et modélisation en chimie quantique d'espèces moléculaires

Objectifs

- Compréhension de la structure et de la réactivité de composés moléculaires issus de la chimie organométallique et inorganique en Sciences Moléculaires.

- Présentation des méthodes semi-empiriques, *ab initio* et DFT ainsi que leurs applications pour l'étude des structures et propriétés électroniques d'espèces moléculaires.

Heures d'enseignement

Chimie théorique - TP	TP	20h
Chimie théorique - CM	CM	30h

Informations non contractuelles.
Dernière mise à jour le 04 janvier 2022

Pré-requis obligatoires

Mécanique quantique appliquée à la chimie ; Chimie Théorique (niveau Licence)

Programme détaillé

Cet enseignement de Chimie Théorique comporte deux parties. Dans la première, nous abordons les concepts issus de la théorie des orbitales moléculaires pour l'étude des propriétés structurales et électroniques de composés moléculaires organométalliques et inorganiques. La méthode de fragmentation sera mise en œuvre pour l'analyse des liaisons chimiques métal-ligands et métal-métal dans des complexes organométalliques. L'analogie isolobale est introduite et autorise un pont entre la chimie organique, inorganique et organométallique. Les règles de Wade-Mingos sont présentées pour la rationalisation des structures de clusters et nanoparticules, tant à l'état moléculaire que solide. L'objectif est la compréhension de la structure et de la réactivité de composés moléculaires issus de la chimie organométallique et inorganique en Sciences Moléculaires. Dans la seconde partie, l'accent sera mis sur les fondements de la mécanique quantique et moléculaire appliquée à la chimie moléculaire. Les méthodes semi-empiriques, *ab initio* et DFT sont exposées ainsi que leurs applications pour l'étude des structures et propriétés électroniques d'espèces moléculaires. La modélisation de molécules et de réactions chimiques est abordée par l'utilisation de codes de calculs en chimie quantique et mécanique moléculaire. Les propriétés structurales (problèmes conformationnels, isomérie), spectroscopiques (ex. IR, RMN) et énergétiques (ex. énergie électronique, enthalpie libre) sont déterminées à l'aide de simulations numériques en chimie quantique.

Informations complémentaires

Les simulations numériques en chimie quantique (TP) sont basées sur des logiciels de recherche (IC2MP) et moyens informatiques (UFR SFA/UP et IC2MP) adaptés à un groupe de 16 étudiants au maximum (8 postes de travail fonctionnels avec licence pour le logiciel , salle Epicure, B7).

Compétences visées

Comprendre les arrangements structuraux rencontrés dans les complexes organométalliques ML_n, les clusters moléculaires et de l'état solide.

Analyser la liaison chimique, rationaliser les propriétés électroniques et la réactivité en chimie organométallique et inorganique à l'aide de la théorie des orbitales moléculaires.

Savoir déterminer les propriétés structurales et électroniques de molécules à l'aide de codes en chimie quantique, ainsi que des profils réactionnels de mécanismes en chimie organique (surface d'énergie potentielle).

Savoir analyser ses résultats et les restituer dans un format propre à la recherche en chimie (publication et communication scientifiques).

Informations non contractuelles.
Dernière mise à jour le 04 janvier 2022

Infos pratiques

Lieu(x)

Poitiers-Campus

Informations non contractuelles.
Dernière mise à jour le 04 janvier 2022