

Chimie quantique en sciences moléculaires

Niveau d'étude
Bac +3

ECTS
6 crédits

Composante
**Sciences Fondamentales
et Appliquées**

Période de l'année
Semestre 5

En bref

Méthodes d'enseignement: En présence

Ouvert aux étudiants en échange: Non

Présentation

Description

Introduction à la chimie quantique

Théorie orbitale appliquée aux atomes et aux molécules

Théorie des groupes appliquée à la théorie des orbitales moléculaires

Principes de réactivité et sélectivité en chimie moléculaire. Théorie des orbitales frontières.

Objectifs

Application de la théorie des groupes en chimie moléculaire.

Constructions de diagrammes d' OM pour la compréhension des propriétés structurales et électroniques de systèmes moléculaires.

Utilisation de la théorie des orbitales frontières pour des études de réactivité et de sélectivité en chimie organique.

Heures d'enseignement

CM	CM	28h
TD	TD	20h
P-Ci-Etu	Classe Inversée - Autonomie	1h
P-CI-CM	Classe inversée - CM	1h

Pré-requis obligatoires

Atomistique, chimie organique et inorganique fondamentales, chimie physique élémentaire (thermochimie), calcul intégral et différentiel.

Compétences visées

Savoir construire la structure électronique d'un atome et en déduire ses propriétés par la méthode de Slater.

Savoir construire un diagramme d'orbitales moléculaires (diatomique A₂ ou AH, molécule symétrique).

Savoir interpréter un diagramme d'orbitales moléculaires (propriétés physico-chimiques).

Savoir déterminer les propriétés de symétrie d'une molécule.

Infos pratiques

Lieu(x)

Poitiers-Campus