

MASTER CHIMIE

PARCOURS CHIMIE ET INTERFACES AVEC LE VIVANT

Semestre 9

S9_CHIV_THEO : Chimie théorique et DFT

Présentation

1. Interactions orbitales en chimie; notions d'orbitales frontières ; construction de diagrammes d'orbitales moléculaires
2. Approche qualitative de la structure électronique de molécules organiques et inorganiques. Chimie des complexes des métaux de transition
3. Relations structure/nombre d'électrons de valence
4. Interprétation théorique des relations structure/propriétés
5. Interprétation théorique de la réactivité
6. Introduction aux méthodes de chimie quantiques (*ab initio*, DFT...)

2 crédits ECTS

Volume horaire

Cours Magistral : 11h

Travaux Dirigés : 2h

Objectifs

Appréhender de façon qualitative la liaison chimique dans les systèmes moléculaires.

Pré-requis nécessaires

Notions d'atomistique. Notions d'orbitales atomiques et moléculaires. Notions de symétrie des groupes.

Compétences visées

Connaître et utiliser les relations entre compte d'électrons et arrangement structural pour les molécules organiques et les complexes de transition. Interpréter les propriétés électroniques et physico-chimiques de molécules simples.

Bibliographie

- 1) T. P. FEHLNER, J.-F. HALET, J.-Y. SAILLARD : "Molecular Clusters. A Bridge to Solid State Chemistry", Cambridge University Press, Cambridge, Grande-Bretagne, 2007.
- 2) T. A. ALBRIGHT, J. K. BURDETT, M-H. WHANGBO : "Orbital Interactions in Chemistry ", Wiley, 2nde edition, 2013.

Modalités de contrôle des connaissances

Session 1 ou session unique - Contrôle de connaissances

Nature de l'enseignement	Modalité	Nature	Durée (min.)	Coefficient	Remarques
Cours Magistral	CT	Ecrit - devoir surveillé	90	1/1	

Session 2 : Contrôle de connaissances

Nature de l'enseignement	Modalité	Nature	Durée (min.)	Coefficient	Remarques
Cours Magistral	CT	Ecrit - devoir surveillé	90	1/1	