

CGP - Chimie physique et Chimie inorganique

**Mécanique quantique et chimie théorique**

24\_25\_3CGP\_06\_PIC\_002\_C

**ACQUIS****CONTENU**

Chapitre 1 : Introduction historique, expériences fondamentales

Rappel de physique classique: mécanique classique, radiations électromagnétiques. Rayonnement du corps noir. Effet photoélectrique, les photons. Spectres atomiques. Théorie de l'atome de Bohr.

Chapitre 2 : Equation de Schrödinger et principes de la mécanique quantique

Dualité onde-corpuscule, l'onde de de Broglie. Equation de Schrödinger et signification physique de la fonction d'onde. Principe d'incertitude de Heisenberg. Les opérateurs en mécanique quantique.

Chapitre 3 : Atome d'hydrogène, notion d'orbitales atomiques

Résolution de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène. Les orbitales de l'atome d'hydrogène (ns, np, nd, ...). Moment cinétique orbital et de spin de l'électron.

Chapitre 4 : Application pratique de la mécanique quantique : la résonance magnétique nucléaire (RMN et imagerie médicale)

Moment cinétique de spin nucléaire et moment magnétique nucléaire. interaction moment magnétique et champ magnétique. Notion de déplacement chimique. RMN à impulsion et transformée de Fourier.

Chapitre 5 : Méthodes générales de résolution de l'équation de Schrödinger

Méthode des variations. Méthode des perturbations. Application à l'atome d'hélium

Chapitre 6 : Atomes polyélectroniques

Principe d'exclusion de Pauli. Configurations électroniques et tableau périodique. Modèle de Slater et approximation de l'effet d'écran. Méthode du champ auto-cohérent de Hartree-Fock. Notions de termes, niveaux et états atomiques. Symboles spectroscopiques. Termes et niveaux fondamentaux des atomes des éléments des quatre premières périodes. Effet Zeeman normal et anormal.

Chapitre 7 : Généralités sur les théories de la liaison chimique. Théorie de la liaison de valence, théorie VSEPR (Valence-Shell Electron-Pair Repulsion) et hybridation des orbitales atomiques.

Théorie de la liaison de valence et théorie des orbitales moléculaires. Modèle VSEPR. théorie de l'hybridation des orbitales atomiques, hybrides  $sp^3$ ,  $sp^2$ ,  $sp$ ,  $sp^3d$ ,  $sp^3d^2$ . Formation des molécules  $CH_4$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_2H_2$ ,  $C_6H_6$ .

Chapitre 8 : Théorie des orbitales moléculaires, molécules diatomiques, énergie électronique

Approximation de Born-Oppenheimer. Approximation orbitale. Combinaisons linéaires d'orbitales atomiques (CLAO). Molécules  $H_2^+$ ,  $H_2$ ,  $He_2^+$ ,  $He_2$ . Molécules diatomiques homonucléaires et hétéronucléaires. Energie de vibration et de rotation.

Chapitre 9 : Théorie des orbitales moléculaires, symétrie moléculaire et théorie des groupes

Utilisation des tableaux de caractères. Etude des orbitales moléculaires et du diagramme orbitalaire de quelques molécules simples:  $H_2O$ ,  $NH_3$ ,  $CH_4$  et d'un complexe octaédrique  $ML_6$ . Modes de vibration actif en infra-rouge et

en Raman.

## Chapitre 10 : Eléments de Thermodynamique Statistique

Notion de macroétat et de microétat. Distribution de Boltzmann. Notion de fonction de partition. Fonctions de partition de translation, de rotation, de vibration, électronique. Expressions des grandeurs thermodynamiques à l'aide de fonctions de partition. Exemple de l'entropie.

## Chapitre 11 : Applications de la chimie théorique à la chimie organique

Mise en œuvre simplifiée des calculs manuels de diagrammes d'orbitales moléculaires : obtention des coefficients et des niveaux d'énergie des orbitales moléculaires, utilisation de la méthode de Hückel pour les systèmes Pi, présentation des principes de la théorie des perturbations.

Utilisation de ces théories pour : aromaticité et régiosélectivité des SEAr, SNAr ; réactions péricycliques et électrocycliques ; transpositions sigmatropiques ; réactions de Diels Alder ; SN2 (inversion de Walden) ; diverses autres applications à la chimie organique (effet anomère...).

## Chapitre 12 : Applications de la chimie théorique à la chimie inorganique

Construction de diagrammes d'orbitales moléculaires, Liaisons Chimiques (sigma et pi), Hypervalence, Prédiction de géométrie et de stabilité (Diagramme de Walsh), Comparaison théorie des orbitales moléculaires et théorie VSEPR.

## PRÉREQUIS

## PÉDAGOGIE

## ÉVALUATION

## BIBLIOGRAPHIE

