

UE Chimie orbitaire



ECTS
3 crédits



Composante
UFR de Chimie
et de biologie



Période de
l'année
Automne (sept.
à dec./janv.)

Diplômes intégrant cet élément

- Licence Chimie

- › Langue(s) d'enseignement: Français
- › Ouvert aux étudiants en échange: Oui
- › Code d'export Apogée: YACH5U13

Présentation

Description

Introduction à la mécanique quantique, étude de l'atome à un électron et des orbitales atomiques.

Etude de la liaison chimique et des orbitales moléculaires. Méthode de Hückel et systèmes PI-conjugués.

Structure électronique des molécules complexes : notions de symétrie moléculaire, méthode des fragments, diagrammes de corrélation.

Introduction à la réactivité entre molécules : orbitales frontières, notions de nucléophile/électrophile, régiosélectivité.

Heures d'enseignement

CM	CM	12h
TD	TD	13,5h

Pré-requis recommandés

Les prélabes pour suivre cet enseignement sont les UE suivantes, ou un programme équivalent :

Atomistique

CHI101 : Structure de la matière

CHI201 : Chimie générale

Période : Semestre 5

Compétences visées

Approfondissement des notions de mécanique quantique, compréhension de la structure électronique des atomes et molécules : fonction d'onde, énergie électronique, orbitales atomiques et moléculaires.

Prédiction qualitative de la structure géométrique et de la réactivité des molécules complexes.

Infos pratiques

Contacts

Responsable pédagogique

Yohann MOREAU

✉ yohann.moreau@cea.fr

Lieu(x) ville

➤ Grenoble

Campus

➤ Grenoble - Domaine universitaire