



## Présentation

**Code interne :** PC5CQUAN

### Description

La Chimie Théorique joue un rôle maintenant majeur dans de nombreux secteurs de la chimie expérimentale. Cet état de fait est dû à son pouvoir interprétatif de la plupart des comportements physico-chimiques de la matière et également à son pouvoir prédictif grandissant par la mise en œuvre de nouveaux modèles et de nouveaux outils calculatoires engendrés grâce à l'essor de l'informatique. Un ingénieur doit être capable d'avoir une attitude critique sur les capacités et les limitations de ces nouveaux moyens d'étude. Comme ces outils reposent principalement sur la Chimie Quantique, les bases fournies par cet enseignement sont nécessaires pour pouvoir décrire théoriquement les propriétés physiques et chimiques des molécules.

Ce cours a pour objectif de proposer une vision des différentes représentations modernes de la structure électronique des systèmes chimiques et de fournir une introduction aux méthodes de calcul d'usage courant dans les logiciels de modélisation moléculaire dits « ab initio » ou « semi-empiriques » (exemple : GAUSSIAN, AMPAC etc ...). Différents modèles de structure approchés seront utilisés, en fonction des objectifs que l'on se donne (quantitatifs ou seulement qualitatifs) et des propriétés que l'on souhaite étudier ou simuler.

### Heures d'enseignement

CM	Cours Magistraux	9,33h
TD	Travaux Dirigés	10,66h

### Pré-requis obligatoires

éléments de Chimie générale, d'Atomistique, de Physique et de Mathématiques du niveau « Classes Préparatoires Math-Sup, Math-Spé » ou Licence 1ère et 2ème années.

### Syllabus

(Entre parenthèses le nombre de créneaux de 1h20)

## CHAP I - LES MOLECULES DIATOMIQUES - CR (2) + TD (2)

- Approximation Born-Oppenheimer
- Approximation LCAO, formation des orbitales moléculaires (OM)
- Méthode des variations linéaires

## CHAP II - METHODE DU CHAMP AUTOCOHERENT : HARTREE-FOCK - CR (2) + TD (2)

- Principe du modèle Hartree-Fock (HF)
- Energie orbitaire et énergie électronique
- Développement des OM sur une base : méthode de Roothan
- La densité électronique
- Limites du modèle HF et modèle des interactions de configurations (IC)

## CHAP III - LES METHODES SEMI-EMPIRIQUES ET MODELES SIMPLIFIES - CR (1) + TD (2)

- Méthodes semi-empiriques de valence
- Méthodes de Hückel et Hückel étendue
- Les orbitales frontières

## CHAP IV - LE MODELE DES ORBITALES MOLECULAIRES - Généralisation - CR (2) + TD (2)

- Symétrie des Orbitales Moléculaires (OM)
- Analyse de la formation des OM
- Diagrammes de corrélation
- Indice de liaison, charge partielle atomique
- Analyse des transferts de charge

---

## Informations complémentaires

Chimie Physique et Analytique

---

## Bibliographie

L. RIVAIL - Eléments de Chimie Quantique à l'usage des chimistes, Inter-Editions et Editions du CNRS (1999) P.W. ATKINS and R.S. FRIEDMAN - Molecular Quantum Mechanics, 3rd edition Oxford University Press (1999)  
R. LALANNE, A. DUCASSE, J. HOARAU, J.C. RAYEZ et coll - Structure électronique et liaison chimique, Masson (1992), English edition, World Scientific Publishers (1994) I.N. LEVINE - Quantum Chemistry, Prentice Hall (1999)

---

## Modalités de contrôle des connaissances

## Évaluation initiale / Session principale

Type d'évaluation	Nature de l'évaluation	Durée (en minutes)	Nombre d'épreuves	Coefficient de l'évaluation	Note éliminatoire de l'évaluation	Remarques
Contrôle en cours de Semestre	Oral	30		0.3		
Contrôle Terminal	Ecrit	90		1		

## Seconde chance / Session de rattrapage

Type d'évaluation	Nature de l'évaluation	Durée (en minutes)	Nombre d'épreuves	Coefficient de l'évaluation	Note éliminatoire de l'évaluation	Remarques
Epreuve terminale	Ecrit	90		1		

## Infos pratiques

### Contacts

#### Intervenant

Cédric Crespos

✉ Cedric.Crespos@bordeaux-inp.fr