

Code UE S3CH624

Intitulé UE TP Chimie théorique et physique

Responsable UE Arnaud MARVILLIERS (arnaud.marvilliers@univ-reunion.fr)

Semestre S6

ECTS 4

Langue d'enseignement Français

Accessible aux étudiants en échange international Oui

Volume horaire (h)

CM	TD	TP	Total
0	0	30	30

Descriptif

Les travaux expérimentaux se dérouleront exclusivement in silico. Les notions de Hückel seront abordées sur les systèmes π délocalisés. Une partie des TP comportera de l'optimisation de géométrie des calculs de fréquences et des études de conformation de composés organiques par les méthodes de DFT.

- L'ion Moléculaire H_2^+ par la théorie des OM.
- Spectres de vibration-rotation de molécules diatomiques. Détermination des constantes de rotation, des distances R_e , R_0 , R_1 , de la fréquence de vibration, de la constante de force, de la constante de distorsion centrifuge (Tableur)
- Méthode de Hückel. Comparaison à l'expérience des énergies de résonance, des indices de liaison, des énergies d'ionisation (logiciel+tableur)
- Modélisation moléculaire n°1 :
- Modélisation moléculaire n°2 - sites de protonation Me-NCO et Me-NCS :
- Modélisation moléculaire n°3 : réactivité chimique et orbitales frontières.

Prérequis

Chimie du L1S1 et du L1S2

L2S3 : S2CH320, S2CH321, S2CH322, S2CH323

L2S4 : S2CH420

L3S5 : S3CH520, S3CH521

L3S6 : S3CH620, S3CH628