

LU2CI001 : Liaisons Intramoléculaires et réactivité

Responsables

P1

Pr Hélène Gérard

LCT (UMR 7616)

Tour 12/13, 4^e étage, bureau 425

01 44 27 96 62

helene.gerard@sorbonne-universite.fr

P2

Dr Isabelle Fourré

LCT (UMR 7616)

Tour 12/13, 4^e étage, bureau 418

01 44 27 96 59

isabelle.fourre@sorbonne-universite.fr

1. Descriptif

Volumes horaires : CM 14 h, TD 13 h, TP 3 h, corrigé CC 2h

Nombre de crédits : 3 ECTS

Barème / 100 : contrôle continu / 70, TP / 30

Parcours : mono-disciplinaire / bi-disciplinaires / mineure

Périodes d'enseignement : P1 et P2

2. Présentation pédagogique

a. Objectifs

À l'issu de cette UE, les étudiant(e)s seront en mesure de construire, compléter et utiliser des diagrammes d'orbitales moléculaires pour déterminer ou expliquer diverses propriétés des systèmes moléculaires : magnétisme, structure, spectroscopie électronique, réactivité.

b. Thèmes abordés

Combinaison d'orbitales atomiques.

Liaison covalente, ionique, iono-covalente.

Diagramme d'orbitales moléculaires par interaction de fragments.

Orbitales frontières.

Symétrie moléculaire, symétrie des orbitales moléculaires, utilisation des tables de caractères.

Lien avec les propriétés moléculaires : dia/paramagnétisme, structure (règle de Walsh), spectroscopie électronique (photoélectron et UV), réactivité (contrôle orbitalaire et de charge).

Systèmes pi et systèmes étendu : délocalisation, conjugaison, aromaticité, limite de la chaîne infinie, conducteur et isolant.

3. Prérequis

Orbitales atomiques : les représenter de façon conventionnelle et les positionner énergétiquement en fonction de leur place dans la classification périodique et de l'extension spatiale.

Lewis et VSEPR : décompter les électrons, séparer le cœur de la valence et construire un schéma de Lewis ; l'utiliser pour déterminer la géométrie des molécules ; trouver les formes mésomères limites.