



## CHIM2252 Chimie organique physique II

[22.5h+0h exercices] 2.5 crédits

Ce cours n'est pas dispensé en 2005-2006

Cette activité se déroule pendant le 1er semestre

Langue d'enseignement : français

Niveau : Second cycle

### Objectifs (en termes de compétences)

Interprétation quantitative de la structure électronique et des propriétés physico-chimiques des molécules organiques.

### Objet de l'activité (principaux thèmes à aborder)

1. Structure électronique des molécules organiques : Hybridation et stéréochimie ; calcul de perturbation intra- et intermoléculaire ; diagrammes de corrélation orbitale et règles de symétrie ; interprétation théorique de quelques propriétés physico-chimiques. 2. La théorie du complexe activé : Principes de base ; surfaces de potentiel ; les énergies d'activation ; profil d'énergie d'une réaction organique ; principe de Polanyi-Evans-Bell ; réactivité - sélectivité ; principe de Curtin-Hammett. 3. Théorie de la réactivité chimique : Méthodes statistiques et dynamiques ; l'état de transition en substitutions aromatiques et arylaliphatiques ; méthode de Fukui et ses applications aux réactions organiques. 4. Acides et bases durs et mous 5. Bases théoriques des relations linéaires d'énergie libre. 6. Effets stéréoelectroniques. Exercices théoriques conçus et réalisés de manière à assurer une aptitude de calcul et d'interprétation autonomes.

### Autres informations (Pré-requis, Evaluation, Support, ...)

Pré-requis : Chimie organique. Chimie physique

Mode d'évaluation :

Examen oral avec préparation écrite.

Support :

Notes de cours rédigées par le titulaire.

### Autres crédits de l'activité dans les programmes

CHIM22 Deuxième licence en sciences chimiques