



Sameh Ayadi

Chimie quantique

Cours et exercices résolus



Table des matières

Cours 1 : Bases de la mécanique

| | |
|--|-----------|
| Quantique..... | 8 |
| I/ Introduction..... | 8 |
| II/ Rappels sur les résultats scientifiques | 10 |
| II.1/ Spectre d'émission | |
| de l'atome d'hydrogène..... | 10 |
| II/ Bases de la mécanique quantique..... | 15 |
| II.1/ Hypothèse de Louis de Broglie..... | 15 |
| II.2/ Principe d'incertitude de Heisenberg..... | 15 |
| II.3/ Equation de schrodinger (1925)..... | 17 |
| II.3.1/ Notion de la fonction d'onde..... | 17 |
| II.3.2/ Equation de Schrödinger..... | 18 |
| III/ Opérateurs..... | 19 |
| III.1/ Définitions..... | 19 |
| III.2/ Exemples d'opérateurs..... | 19 |

AYADI. S

| | |
|---|----|
| <u>a/ Opérateur position \hat{x}</u> | 19 |
| <u>b/ Opérateur impulsion \hat{P}_x</u> | 20 |
| III.3/ Propriété des opérateurs | 20 |
| <u>a/ Opérateur linéaire</u> | 20 |
| <u>b/ Opérateur produit de deux opérateurs</u> | 20 |
| <u>c/ Commutateur de deux opérateurs</u> | 21 |
| <u>d/ Relation entre commutateurs</u> | 21 |
| Exercices | 22 |
| Correction | 24 |
| Références | 27 |
| | |
| Cours 2 : Orbitales moléculaires | 28 |
| I/ Introduction | 28 |
| II/ Résolution de l'équation de Schrödinger | 28 |
| II.1/ Approximation de Born –oppenheimer | 29 |
| II.2/Approximation monoélectronique | 30 |

III/ Rappels sur la théorie

des orbitales moléculaires (T.O.M)..... 30

III.1/ Orbitale moléculaire d'une

molécule diatomique homonucléaire (A₂)..... 31

A/ Molécules symétriques

de la première période (H₂ et He₂)..... 31

B/ Molécules symétriques de

la deuxième période 33

1/ Recouvrement axial : liaison σ 34

2/ Recouvrement latéral : liaison π 34

3/ Exemple de diagramme

d'énergie des molécules..... 35

III.2/ Orbitale moléculaire d'une

molécule diatomique non symétrique

de type AB..... 37

IV/ Orbitales moléculaires des molécules

diatomiques homonucléaire..... 40

IV.1/ Calculs des Orbitales moléculaires..... 40

IV.2/ Interprétation des orbitales

moléculaires liantes et antiliantes..... 44

| | |
|--|-----------|
| IV.3/ Exemples des interactions des électrons pour former des OM..... | 45 |
| V/ Orbitales moléculaires des molécules hétéronucléaires..... | 47 |
| V/ Orbitale moléculaires π des polyatomiques..... | 49 |
| Exercices..... | 53 |
| Correction..... | 57 |
| Références..... | 69 |
| | |
| Cours 3 : Etude des molécules par la méthode de Hückel : Théorie de Hückel..... | 70 |
| I/ Introduction..... | 70 |
| II/ Méthode de Hückel simple..... | 71 |
| II.1/ Déterminant séculaire énergie et coefficients | 72 |
| II.2/ Diagramme d'orbitales moléculaires..... | 73 |
| II.3/ Charges électroniques et indice de liaison..... | 74 |

AYADI. S

| | |
|--|------------|
| III/ Méthode de Huckel étendue..... | 74 |
| IV/ Etude comparative entre la méthode de Hückel simple et Hückel étendue :cas de l'éthylène..... | 76 |
| IV.1/ Huckel étendue..... | 76 |
| IV.2/ Huckel simple..... | 78 |
| Exercices..... | 80 |
| Correction..... | 83 |
| Références..... | 98 |
| | |
| Cours 4 : Réactivité chimique..... | 99 |
| I/ Etude thermodynamique..... | 100 |
| II/ Etude cinétique..... | 102 |
| III/ Contrôle cinétique et thermodynamique..... | 105 |
| IV/ Orbitales frontières..... | 107 |
| IV.1/ Définition..... | 107 |
| IV.2/ Interactions frontières et réactivité..... | 108 |
| IV.3/Réaction d'époxydation des monoterpènes bicycliques :l'α-pinène..... | 112 |

AYADI. S

| | |
|------------------------|------------|
| Exercices..... | 114 |
| Correction..... | 118 |
| Références..... | 123 |