

# Liaison chimique / Chemical bonds

 Composante  
Polytech  
Grenoble - INP,  
UGA

- > **Langue(s) d'enseignement:** Français
- > **Ouvert aux étudiants en échange:** Oui
- > **Code d'export Apogée:** KAMA6M09

## Présentation

### Description

Présentation des différents types de liaisons chimiques pour conduire à la compréhension des états condensés de la matière. Cours réalisé par une méthode APP (Apprentissage Par Problème) en connexion avec le cours de Physique du solide.

- 1 La liaison chimique : Les molécules diatomiques homo-nucléaires
  - 1.1 L'ion moléculaire  $H_2^+$
  - 1.2 Méthode variationnelle, OM-CLOA
  - 1.3 La molécule de dihydrogène
  - 1.4 Introduction aux spectroscopies photoélectroniques XPS, UPS, ESCA
- 2 La liaison chimique : Les molécules diatomiques hétéro-nucléaire
  - 2.1 Les molécules CO et HF
  - 2.2 La liaison ionique: cas extrême de la liaison covalente
  - 2.3 Moments dipolaires et différence d'électronégativité
- 3 Les molécules polyatomiques
  - 3.1 Comparaison des approches par OM-CLOA et par hybridation des orbitales atomiques: molécules  $BeH_2$ ,  $BH_3$ ,  $CH_4$ ,  $H_2O$
  - 3.2 Approximation des électrons pi appliquée aux hydrocarbures conjugués ou aromatiques, stabilisation par délocalisation électronique

Presentation of the different types of chemical bonds to lead to an understanding of the condensed states of matter. Course realized by an APP (Problem Learning) method in connection with the Solid State Physics course.

- 1 The chemical bond: The homonuclear diatomic molecules
  - 1.1 The molecular ion  $H_2^+$
  - 1.2 Variational method, OM-CLOA
  - 1.3 The dihydrogen molecule
  - 1.4 Introduction to XPS, UPS, ESCA Photoelectron Spectroscopies
- 2 The chemical bond: The diatomic molecules heteronuclear
  - 2.1 The CO and HF molecules
  - 2.2 The ionic bond: extreme case of the covalent bond
  - 2.3 Dipolar moments and difference of electronegativity
- 3 Polyatomic molecules
  - 3.1 Comparison of OM-CLOA and atomic orbital hybridization approaches:  $BeH_2$ ,  $BH_3$ ,  $CH_4$ ,  $H_2O$  molecules
  - 3.2 Approximation of pi electrons applied to conjugated or aromatic hydrocarbons, stabilization by electronic delocalisation

---

## Objectifs

---

## Heures d'enseignement

Liaison chimique / Chemical bonds - CM	CM	16h
Liaison chimique / Chemical bonds - CMTD	Cours magistral - Travaux dirigés	16h

---

## Pré-requis recommandés

- Cours de chimie quantique : Notions de base en mécanique quantique, valeurs propres et fonctions propres, atomistique , orbitales atomiques
- Calcul différentiel et intégral, matrices et déterminants
- Basis in quantum mechanics, wavefunctions, atomic orbitals, quantum chemistry,
- Differential and integral calculations, matrix and determinants

**Période** : Semestre 6

## Évaluation initiale / Session principale - Épreuves

Libellé	Nature de l'enseignement	Type d'évaluation	Nature de l'épreuve	Durée (en minutes)	Nombre d'épreuves	Coefficient de l'épreuve	Remarques
						30/100	

## Bibliographie

- Chimie Physique-Approche moléculaire- D.A. McQuarrie, J.D.Simon Dunod- 2000
- Liaison chimique et spectroscopie-M. Chabanel, P.Gresser Ellipse-1991
- Chimie inorganique-Huheey, Keiter& Keiter De Boeck Université 1998
- Les électrons et la liaison chimique -H.B Gray Ediscience-1969

## Infos pratiques

### Lieu(x) ville

> Grenoble

### Campus

> Grenoble - Saint-Martin d'Hères