

Liste des prérequis

L3 Physico-Chimie Moléculaire

La numérotation des UE mentionnées dans ce descriptif renvoie à des UE dispensées dans la licence de chimie de l'Université Paris-Sud, dont le contenu est disponible sur le site de l'université à l'adresse :

<http://www.u-psud.fr/fr/formations/diplomes/licences/sciences-technologies-sante/chimie.html>

UE du premier semestre

Chimie organique générale et mécanismes réactionnels (Chim301c)

Contenu

La description correcte des caractéristiques des molécules doit être maîtrisée par un chimiste organicien. La première partie de ce module développe les conséquences sur l'acido-basicité et sur la réactivité des molécules organiques des effets électroniques inductifs et mésomères. L'analyse des effets stériques et conformationnels est également un outil permettant d'interpréter des résultats expérimentaux et d'étudier les mécanismes réactionnels.

La connaissance approfondie de la structure tridimensionnelle et de la réactivité potentielle d'une molécule permettra d'envisager des voies générales de synthèse. En effet, l'obtention de molécules organiques élaborées s'appuie sur la prévision de la réactivité de liaisons ou fonctions caractéristiques. Ce module constitue également une approche stratégique de synthèse organique via l'étude de grands mécanismes ioniques, radicalaires ou concertés : substitutions, éliminations, additions. Partant de constatations expérimentales, les grands modèles de mécanismes sont développés. Les aspects cinétiques, thermodynamiques, orbitales ainsi que stéréochimiques sont abordés pour étayer ces mécanismes.

Pré-requis

Hybridation des orbitales atomiques, effets mésomère et inductif, formalisme pour les mécanismes, représentation des molécules (Cram, Newman), caractéristiques des substitutions et éliminations (niveau L2), oxydoréduction, cycles catalytiques simplifiés, nucléophilie/électrophilie, acidobasicité

Chimie inorganique (Chim303c)

Contenu

Modélisation de la structure électronique des métaux de transition dans un champ de ligands en relation avec leur structure, leur propriété et leur réactivité.

1- Rappel des modèles connus pour décrire la structure électronique des métaux de transition dans un champ de ligands (décompte des électrons, modèle du champ cristallin).

2- Structure électronique de l'atome (configuration électronique, états d'énergie d'une configuration électronique). Particularité des atomes formant les complexes des métaux de transition.

3- Modèle des orbitales moléculaires et structure électronique des ligands. Effet de la formation de la liaison métal-ligand sur les propriétés et la réactivité des ligands. Notions de spectroscopie de photoélectron pour l'étude de la structure électronique des molécules.

4- Modèle des orbitales moléculaires et structure électronique des complexes des métaux de transition. Effet de la nature des ligands sur les propriétés et la réactivité des complexes des métaux de transition. Modèle du recouvrement angulaire. Notions de spectroscopie électronique pour l'étude de la structure électronique des complexes des métaux de transition.

Pré-requis

Atomistique (configuration électronique, représentation des orbitales s, p et d) ; Notions de rayon atomique, potentiel d'ionisation, électronégativité ; Distribution des électrons de valence et géométrie des molécules formées d'éléments du bloc p ; Modèle des orbitales moléculaires dans le cas de molécules diatomiques simples

Chimie du solide et cristallographie (Chim308c)

Contenu

Symétries des cristaux : cristallographie

- Réseaux et systèmes cristallins
- Symétries, groupes ponctuels et groupes d'espace
- Table internationale de cristallographie et description structurale

Le solide cristallin :

- Description des différents modèles de liaison, structure de bande et propriétés associées
- Description de l'état cristallin (maille, empilement, polyèdres de coordination, ...) : structures types métalliques, covalentes, moléculaires et ioniques.
- Modèle ionique : règles de Pauling, énergie de réseau, écart au modèle
- Etude de quelques cas particuliers : spinelles

Du cristal parfait au cristal réel :

- Notion de défauts ponctuels (notation de Kröger-Vinck) : défauts intrinsèques et extrinsèques, solides stœchiométriques et non-stœchiométriques.
- Solution solide
- Equation de formation et thermodynamique des défauts
- Etude des propriétés physiques associées (optique, électrique)
- Exemples : centres colorés, les oxydes de métaux de transition

Synthèse et propriétés des solides; microparticules et nanoparticules.

- Méthodes de synthèse à partir de précurseurs moléculaires (nucléation-croissance, voie sol-gel, condensation en solution aqueuse) Elaboration de nanoparticules métalliques, et notions de synthèse de polymère (polymérisation en chaîne et par étapes).
- Propriétés : électroniques, magnétiques, et optiques; relation entre structure et propriétés finales du matériau.

Pré-requis

Définition de l'état cristallin, géométrie euclidienne et opérations de symétrie (rotation, translation, réflexion), électronégativité, types d'empilement d'atomes et structures cristallines simples de type MX, thermodynamique. Notions de cinétique (équations différentielles du 1er ordre).

Thermodynamique et électrochimie (Chim319)

Contenu

Thermodynamique :

1. Fonctions d'état. Evolution spontanée d'un système.
2. Le corps pur. Diagramme d'état
3. Les mélanges. Notion d'activité. Cas des gaz, des liquides et des solutions
4. Mélanges binaires. Diagrammes de phases.
5. Equilibres chimiques. Lois de déplacement des équilibres
6. Potentiel chimique et potentiel électrochimique

Electrochimie :

1. Force ionique et équation de Debye-Hückel
2. Potentiel absolu et potentiel relatif d'électrode
3. Electrodes de référence, équation de Nernst
4. Piles et accumulateurs ; force électromotrice
5. Pile de concentration ; jonction liquide en régime stationnaire: potentiel de jonction
6. Diagrammes $E=f(\text{pH})$

Pré-requis

Thermodynamique : description d'un système thermodynamique (variables d'état, phase) ; fonctions d'état (U, H, S) ; premier et second principe ; diagramme de phases d'un corps pur ; différentielle totale exacte
Electrochimie : cours de chimie des solutions niveau L2 (type chim205b)

Mécanique quantique (Chim321)

Contenu

Le but du module est de conduire à une connaissance approfondie des notions de base de la mécanique quantique qui seront utilisées dans d'autres modules dont la spectroscopie et la chimie théorique. Un objectif est d'apprendre à développer un sens de la modélisation et un sens quantique, c'est à dire penser en termes d'ondes et à acquérir une base solide concernant les concepts de la physico-chimie.

Introduction à la mécanique quantique (aspects indépendant du temps)
Equations de Schrödinger
Postulats et outils (opérateurs, équations aux valeurs propres)
Oscillateur harmonique linéaire et à deux dimensions
Moment cinétique orbital et spin
Atomes hydrogénoïdes
Méthodes de résolution approchées, méthode des perturbations, méthode des variations
Composition de moments cinétiques
Particules indiscernables
Vibration des molécules polyatomiques, modes normaux

Pré-requis

Calcul matriciel, fonctions complexes, équations différentielles

Symétrie (Chim347)

Contenu

Présentation simple de la théorie des groupes pour les chimistes
Applications : détermination des groupes de symétrie de molécules, détermination d'orbitales moléculaires de symétrie et détermination de la symétrie des états électroniques dans des cas simples.
Eléments de symétrie, Opérations de symétrie, groupes ponctuels, classes d'équivalence, détermination des groupes ponctuels
Représentations des groupes par des ensembles de nombres ou de matrices carrées
Représentation sur une base d'OA s, p ou d
Représentations irréductibles, tables de caractères
Projecteurs
Application à la détermination des OM de symétrie
Application à la détermination des symétries des états électroniques.
Règles de sélection en spectroscopie UV-vis.

Pré-requis

Représentations matricielles, multiplication matricielle. Orbitales atomiques.

Formation générale

Contenu

L'objectif de ces deux TP est d'apporter aux élèves une culture scientifique, une pratique expérimentale en chimie inorganique minérale et moléculaire. L'approche expérimentale est agrémentée de notions théoriques et d'une mise en perspective des expériences dans leur contexte historique et scientifique. Une participation active des étudiants est exigée par une démarche d'investigation. Le premier TP porte sur différents types de réactions pouvant présenter des risques afin de sensibiliser les élèves à la sécurité en Chimie. Le deuxième TP consiste en l'analyse d'une eau au moyen de différentes techniques (conductimétrie, pH-métrie, colorimétrie, potentiométrie, reflectométrie...). Ce module comprend des conférences d'acteurs industriels et de la recherche par la participation à une (ou plusieurs) conférence(s) scientifique(s). Des visites d'entreprises seront également envisageables.

Pré-requis

Aucun

UE du second semestre

Spectroscopies (Chim322)

Contenu

Résumé

L'objectif est de familiariser les étudiants avec la description fondamentale complète des états atomiques. L'interaction lumière-matière est envisagée dans le cadre de l'interaction dipolaire-électrique. Les règles de sélection et les applications spectroscopiques des transitions impliquées sont considérées aussi bien pour les atomes (analyse élémentaire par spectrométrie d'émission induite par laser) que pour les molécules diatomiques dans leur état électronique fondamental (spectroscopie de rotation pure et de rotation-vibration).

Introduction – Interaction matière rayonnement

Description d'un atome : de l'atome d'hydrogène aux atomes polyélectroniques

L'interaction spin-orbite

Action d'un champ externe sur un atome : l'effet Zeeman

Transitions optiques dans les atomes

Introduction à la structure moléculaire

Spectroscopies micro-onde et infra-rouge dans la molécule diatomique

Spectroscopie Raman, exemple de spectroscopie non linéaire

Pré-requis

- Lumière : notion de photon, éléments sur les ondes électromagnétiques,
- Description : description simple des atomes et des molécules,
- Eléments de mécanique quantique I : équation de Schrödinger stationnaire, hamiltonien, états et valeurs propres, moment angulaire orbital L (vus dans le module Chim321)
- Eléments de mécanique quantique II : oscillateur harmonique (vibrateur, vu dans le module Chim321)

Chimie théorique et numérique (Chim328)

Contenu

Cette UE a pour objectif de couvrir les concepts de base de la chimie théorique, de développer la description de la structure électronique des atomes et des molécules, de mettre en perspective les approches qualitatives et quantitatives, d'illustrer et de mettre en pratique toutes les notions au travers d'exemples variés.

Chapitre I : Structure électronique d'un atome et termes spectroscopiques

Chapitre II : Niveaux d'énergie de l'atome et orbitales atomiques : détermination numérique

Chapitre III : Structure électronique des molécules - Approximations fondamentales

Chapitre IV : Méthodes de Chimie quantique

Chapitre V : Méthodes empiriques et théorie des OM

Chapitre VI : Structure et réactivité vues par les deux approches

Pré-requis

Mécanique quantique (Chim321) : solutions de l'équation de Schrödinger à un électron, propriétés des orbitales atomiques de H, Méthodes de résolution approchée par la théorie des perturbations et méthodes des variations, principe d'indiscernabilité

Groupes de symétrie (Chim347)

OA/OM : principes de combinaison d'OA dans la théorie des orbitales moléculaires, construction de diagrammes d'OM de molécules diatomiques et triatomiques

Chimie organique approfondie (Chim342D)

Contenu

- Organométalliques : organomagnésiens, organolithien, organocuprates et organozinciques. Dérivés carbonylés et dérivés d'acides:

- Electrophilie de la liaison C=O des carbonyles au travers de l'étude de réactions d'additions de divers nucléophiles (alcools, amines, thiols, organométalliques et hydrures métalliques) -Etude de l'induction stéréochimique potentielle liée à l'addition nucléophile sur des fonctions carbonyles. A travers la réactivité d'énolates, d'énols et de leurs équivalents synthétiques (énamines, métalloénamines et éthers d'énols silylés), la C-alkylation, l'acylation, l'aldolisation, l'addition conjuguée et l'annélation de Robinson seront développées pour la formation de liaison C-C. Etude de l'addition de Michael avec les nitroalcane, les carbones soufrés et les réactifs organocupreux. - α -halogénéation, réarrangement de Favorski.

- Chimie des composés carboxylés et molécules polyfonctionnelles: réactions d'addition-élimination comprenant les différentes méthodes d'estérification, de formation d'amides, par des réactions d'addition réductrice (organométalliques, hydrures métalliques), de réarrangement (Hofmann, Curtius), d'halogénéation, de Réformatski, de Claisen et par l'action de diazométhane. Propriétés des composés α -dicarbonylés (acidité des hydrogènes en α , décarboxylation des β -cétoesters) ainsi que leur utilisation en synthèse organique.

Pré-requis

Addition électrophile, substitution nucléophile, éliminations, réactivité des dérivés halogénés, des alcools et des amines ; stéréochimie, représentation spatiale des molécules, orbitales moléculaires, mésomérie

Interface physique et chimie (Chim345)

Contenu

Notions de base en optique, électronique, magnétisme et mécanique des fluides, afin de permettre au physico-chimiste d'appréhender les problématiques dans des domaines tels que :

- la réalisation de dispositifs opto-électroniques (LED, cellules photovoltaïques, écran LCD...)

- la mise en œuvre de systèmes microfluidiques

- le développement de dispositifs dédiés au stockage de l'information (mémoires)

L'enseignement sous forme de TP ou de projet interdisciplinaire est un moyen privilégié pour l'apprentissage de cette discipline à l'interface physique-chimie.

Pré-requis

Optique géométrique, transformée de Fourier, bases de l'électromagnétisme, bases de conduction électrique et diffusion, quelques notions de mécanique quantique (Schrödinger, hamiltonien, fonction d'onde, moment cinétique, spin, singulet, triplet, atome d'hydrogène).

Interface biologie et chimie (Chim346)

Contenu

Diversité des molécules et macromolécules biologiques : Présentation des principaux composants du vivant (Structure, localisations subcellulaires et quelques fonctions biologiques associées) : acides nucléiques, nucléotides, nucléosides, protéines, peptides, lipides, sucres.

Structure et fonction des protéines : Présentation des concepts clés concernant la structure des protéines : différents niveaux de structure, repliement, plasticité de la structure tridimensionnelle, nature et conséquences de quelques modifications covalentes physiologiques. Discussion de l'importance des relations structure/fonction (en incluant quelques éléments sur les mécanismes biologiques de contrôle de l'activité) : cas des enzymes, cas des protéines interagissant avec l'ADN.

Éléments de cinétique enzymatique : Cinétique d'une enzyme Michaelienne, paramètres cinétiques, effets des conditions physico-chimiques, différents types d'inhibiteurs. Pharmacologie antivirale : VIH, virus de l'hépatite B, de l'hépatite C, de la grippe.

De l'étude des voies métaboliques aux voies de synthèses organiques performantes de molécules à visée thérapeutique : La description de grandes voies de biosynthèse de métabolites secondaires (voie « acétate », voie « mévalonate », voie « shikimate » ...) permettra d'examiner l'originalité et la puissance des mécanismes chimiques en milieux biologiques. Cet approfondissement conduira à la mise au point de méthodes de synthèses organiques performantes, s'inspirant de la richesse de la nature et des mécanismes chimiques enzymatiques (hémisynthèses, synthèses biomimétiques, réactions dominos...). Elle sera illustrée par des synthèses organiques de composés à visée thérapeutique utilisant ces stratégies de synthèse performantes.

Synthèse peptidique : Présentation de stratégie et méthodologie générale de synthèses peptidiques avec différents agents de couplage. Protection des fonctions amine et acide carboxylique, problème d'épimérisation, synthèse en solution et en phase solide.

Apprentissage sur la recherche bibliographique et la rédaction d'un rapport : Présentation des revues périodiques et des moteurs de recherche bibliographique (Reaxys, Web of Knowledge). Principe de la rédaction d'un rapport bibliographique.

Pré-requis

Connaissances de base de chimie organique et de cinétique chimique (Niveau L2).

Cinétique (Chim348)

Contenu

Cinétique

Vitesse d'évolution d'un constituant intervenant dans plusieurs réactions

Réactions successives : AEQS

Réactions parallèles : réactions jumelles, réactions compétitives

Réactions opposées : équilibre cinétique, relation thermodynamique/cinétique

Réactions en chaîne et de leurs applications

Catalyse homogène, hétérogène et enzymatique

Théorie des collisions

Pré-requis

Connaissance des définitions de base de cinétique formelle (vitesse de réaction, apparition, disparition d'un composé, ordre partiel, global, constante de vitesse). Loi de vitesse d'ordre simple (0,1,2) et traitement analytique des équations différentielles. Méthodes expérimentales de détermination de l'ordre. Effet de la température sur la loi de vitesse.

Mécanique Quantique – Compléments (Chim349)

Contenu

Introduction aux aspects temporels de la mécanique quantique en connection avec les expériences résolues en temps.

Les thèmes abordés sont : dynamique électronique et vibrationnelle, états superposés ou paquets d'ondes, cohérences quantiques, manipulation des états quantiques, approximation adiabatique et approximation soudaine et leurs applications en dynamique non adiabatique.

Pré-requis

Le prérequis est le module de mécanique quantique 321c du S5

Formation générale

Contenu

Les TP permettent d'apporter aux étudiants une culture scientifique et une pratique expérimentale en chimie inorganique minérale et moléculaire et d'aller vers les matériaux et les procédés. Un TP est consacré à la chimie industrielle, en particulier aux différentes étapes mise en œuvre en métallurgie et aux polymères. La spectroscopie est ensuite étudiée puis les matériaux seront examinés à l'échelle nanométrique comme introduction au domaine des nanosciences.

Le monde de la recherche et les enjeux de la chimie sont présentés au travers de conférences.

La maîtrise de l'informatique et de la navigation internet est aussi une nécessité, sanctionnée par le Certificat Informatique et Internet (C2i).

Pré-requis

Aucun