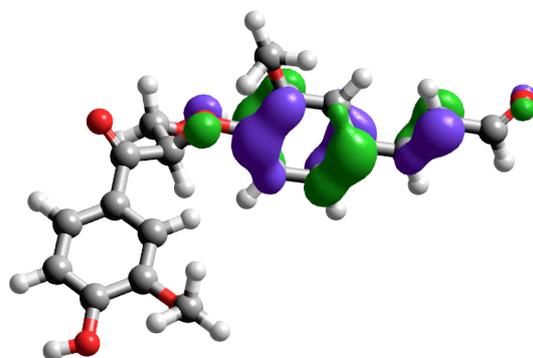


# Travaux Pratiques de Chimie Quantique

*UAB.Tlemcen*



Dr. MANSOURI Hadjer

Université Abou-Bekr Belkaïd –Tlemcen

Faculté des Sciences

Département de Chimie

Email : *hadjer.mansouri@univ-tlemcen.dz*

# Table des matières



<b>Objectifs</b>	3
<b>I - Rappels et prérequis</b>	4
1. Bases de la Chimie .....	4
2. La réactivité Chimique .....	5

# Objectifs

Le présent support du cours + fiches de travaux pratiques de la matière « **chimie quantique** » est destiné aux étudiants de 3<sup>ème</sup> licence chimie (département de chimie, faculté des sciences, université Abou-Bekr Belkaid de Tlemcen). Il vise à fournir aux étudiants un ensemble de connaissances de base sur les méthodes les plus souvent rencontrées en modélisation moléculaire afin d'atteindre différents objectifs :

- Compréhension des Principes Fondamentaux : Les étudiants comprendront les principes de base de la chimie quantique et de la modélisation moléculaire.
- Maîtrise des Outils de Modélisation : Les étudiants sauront utiliser des logiciels de modélisation moléculaire.
- Application des Techniques de Modélisation : Les étudiants appliqueront des techniques spécifiques pour étudier les molécules.
- Analyse et Interprétation des Résultats : Les étudiants interpréteront les données des simulations moléculaires.
- Développement de Compétences Pratiques : Les étudiants développeront des compétences pratiques en modélisation.



Molécules Diatomiques : Deux atomes (O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>).

Molécules Polyatomiques : Trois atomes ou plus (H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>).

### 3. Les Liaisons Chimiques

**Définition** : Les liaisons chimiques sont des forces qui maintiennent les atomes ensemble dans les molécules.

**Types de Liaisons** :

Liaison Covalente : Partage d'électrons entre deux atomes. Peut être simple (H-H), double (O=O), ou triple (N≡N).

Liaison Ionique : Transfert d'électrons d'un atome à un autre, créant des ions positifs et négatifs qui s'attirent (NaCl).

Liaison Métallique : Partage des électrons de valence entre plusieurs atomes dans un réseau métallique.

**Propriétés des Liaisons** :

Énergie de Liaison : Énergie nécessaire pour rompre une liaison.

Longueur de Liaison : Distance entre les noyaux des deux atomes liés.

## 2. La réactivité Chimique

### 1- Définition

La réactivité chimique décrit la capacité des substances à subir des transformations chimiques.

### 2- Types de Réactions :

- Réactions de Synthèse : Deux ou plusieurs réactifs forment un produit ( $A + B \rightarrow AB$ ).
- Réactions de Décomposition : Un composé se décompose en deux ou plusieurs produits ( $AB \rightarrow A + B$ ).
- Réactions de Substitution : Un atome ou un groupe d'atomes remplace un autre dans une molécule ( $AB + C \rightarrow AC + B$ ).
- Réactions d'Oxydoréduction : Transfert d'électrons entre réactifs, incluant les réactions d'oxydation (perte d'électrons) et de réduction (gain d'électrons).

### 3- Facteurs Influant la Réactivité :

- Température : Augmente généralement la vitesse des réactions chimiques.
- Concentration : Une concentration plus élevée de réactifs peut augmenter la vitesse de réaction.
- Catalyseurs : Substances qui augmentent la vitesse de réaction sans être consommées.
- Surface de Contact : Plus la surface de contact est grande, plus la réaction peut être rapide (important pour les solides).