

LC2 : Méthode de Huckel et applications

Leçon présentée par Valentin

Element imposé : Formule de Coulson

Niveau : L3

Prérequis :

- méca Q : Equation de Schrödinger
- Mécanique quantique (opérateur, bra-ket, normalisation)
- Orbitale atome hydrogénoïde
- Chimie orbitale (OA, OM, diagrammes, recouvrement)

Evaluation diagnostique (QCM wooclap)

Difficultés :

- Calculs théoriques
- Résolution de systèmes d'équations
- α et β négatifs

Séquence pédagogique

- TD Application de la méthode de Hückel à des molécules plus complexes (éthanol, butadiène), prévision de réactivité D-A
- TP Informatique : utilisation de HuLis

Biblio : Chaquin, Jean et Volatron

Introduction

Etudier le comportement des molécules. Avant on se basait sur le résultat d'expériences mais les calculs théoriques permettent de prévoir la réactivité.

Avant, on faisait des diagrammes orbitales qualitativement. Ici, on calcule les coefficients et les énergies.

1 Positionnement du problème

1.1 Equation de Schrödinger

On connaît l'équation aux valeurs propres

$$H\Psi = E\Psi$$

Non résoluble pour des systèmes plus compliqués que l'atome hydrogénoïde.

On doit donc utiliser des approximations.

1.2 Approximations

On commence par l'**Approximation de B-O** Qui nous dit que les masses des noyaux étant très grandes devant les masses des électrons, on peut découpler leurs mouvements :

$$\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = \phi_{el}(\vec{r})\chi_{RV}(\vec{R})$$

On a également l'**approximation monoélectronique**

$$\phi_{el}(e_1, e_2, \dots, e_N) \simeq \phi_1(e_1)\phi_2(e_2)\dots\phi_N(e_N)$$

On a également la théorie CLOA.

$$\Phi_i \simeq \sum_j c_j \chi_j$$

2 Méthode de Hückel

2.1 Déterminant séculaire

considérons un système π conjugué.

2.2 Méthode de Huckel simple

2.3 Paramètres

3 Application

3.1 Calcul d'énergie pour l'éthène

3.2 Formule de coulson

Conclusion

Questions

- Equation de Schrödinger (ne dépend pas du temps pourtant) ?
- à quoi correspond \hat{H} ? C'est l'opérateur qui permet de calculer l'énergie de la molécule : cinétique, potentielle d'interaction.
- Qu'est-ce que Ψ ? Fonction d'onde, solution propre de l'hamiltonien, son carré est la densité de proba de présence. Sa phase joue un rôle dans les interactions.
- Comment retrouver les objets "orbitale moléculaire" dessiné ? surface d'isodensité de probabilité de présence à 95%, partie radiale et angulaire.
- Stabilité du cyclobutadiène ? Antiaromatique donc pas stable.