

**Master Class Chimie-La liaison chimique
Philippe Hiberty**

1^{er} cours : Jeudi 19 Septembre 2019 - 10h à 12h

Rappel Théorie de Hartree Fock et Théorie Valence Bond

Fonctions d'onde polyélectroniques, déterminants de Slater
Théorie de Hartree-Fock, Orbitales moléculaires (OM)
Théorie valence bond (VB)
Comparaison Hartree-Fock/VB
Interaction de configurations (IC)
Hybridation et applications
Passage d'OM-IC à VB

2^{ème} cours: Jeudi 19 Septembre 2019 - 14h à 16h

Théories valence bond qualitative

Ecriture d'une fonction d'onde VB
Liaisons à 2 et 3 électrons, représentation VB du dioxygène
Energies d'interaction en termes d'intégrales β et S
Orbitales moléculaires localisées
Passage de représentation délocalisée à localisée et applications
Energies de résonance et application à l'hypervalence

3^{ème} cours: Vendredi 20 Septembre 2019 - 10h à 12h

Applications de la théorie VB à la réactivité

Diagrammes de corrélation VB
Prédiction/rationalisations des barrières de réaction :

- réactions radicalaires
- substitutions nucléophiles
- cycloadditions 1,3-dipolaires

4^{ème} cours: Vendredi 20 Septembre 2019 - 14h à 16h

Méthodes VB ab initio

Choix des structures VB : règles de Rumer
Orbitales localisées ou semi-localisées
Méthode Generalized valence bond (GVB)
Méthode VBSCF
Breathing-orbital valence bond (BOVB)
Etats diabatiques