

**Rapport de l'examen « Chimie théorique & modélisation »**

par Dr Gilles Frapper, Université de Poitiers (France)

17 présents, 15 copies remises. Moyenne : 10,4/20. Pour vous situez :

Notes	0-5	5-8	8-10	10-12	12-14	14-20
Nombre de copies	1	0	7	2	3	2

7 étudiants ont la moyenne dont deux ont une note de  $\sim 14,5/20$ . Mes félicitations car cette matière est nouvelle et l'enseignement *franco-anglais* a pu être un handicap pour certains étudiants.

**Exercice 1** (12 points). La construction de molécules à l'aide du programme de modélisation CHEM3D semble maîtrisée. Les enthalpies de formation en  $\text{kcal.mol}^{-1}$  sont souvent données avec 4 ou 5 chiffres après la virgule alors qu'une précision au dixième suffisait. Les applications numériques sont souvent ignorées, voire erronées ; le calcul de la constante d'équilibre  $K$  n'a pas été traité - aucun étudiant n'a répondu ! - ce qui est inquiétant. Les définitions de « position équatoriale » et « position axiale » dans un cyclohexane ne sont pas connues bien qu'elle furent définies lors d'un exercice... Pour le triméthyltrioxane en conformation chaise, 4 isomères de position des groupes méthyles auraient dû être trouvés (aaa, aae, aee, eee).

**Exercice 2** (6,5 points). L'exercice 2, basé sur des acquis de L1/L2, est en général très bien traité. Les exercices « Lewis&VSEPR » effectués en cours ont donc été compris et assimilés.

*Les exercices 1 et 2 devaient être traités en 50 minutes maximum, ce qui fut le cas par de nombreux étudiants.*

**Exercice 3** (1,5 points). Les longs calculs – 20 minutes maximum ...– permettaient de relire sa copie ou répondre aux questions de l'exercice 2 ou 4.

Seulement, cet exercice 3, en lien avec le cours de chimie organométallique, n'a pas été traité hormis la 1<sup>ère</sup> question (confusion entre isoélectronique – réponse correcte – et isoélectrique). La formule de Lewis de CO faisant apparaître une triple liaison CO est généralement ignorée. Cet exercice demandait des connaissances de base en chimie organométallique ou chimie des métaux de transition en chimie minérale (ligands, structures géométriques de complexes  $ML_4$ , décompte d'électrons). Aussi, sa prise en compte dans la note globale est révisée et bien plus faible que prévue (initialement, 35% de la note).

**Exercice 4** (+1 point de bonus). Bonnes réponses en général. Mendeleiev est un scientifique du 19<sup>e</sup> siècle (et non du 17<sup>e</sup> ou 18<sup>e</sup>) ! MP2 ne signifie pas *Mécanique Préquantique* mais « théorie » Möller-Plesset au second-ordre.

En général, la rédaction de l'examen est peu soignée, voire négligée hormis 4 copies.

## Notes de l'examen en chimie théorique & modélisation

Licence francophone L3 – 2007-2008

NOM - PRENOM*	TOTAL/20
ASĂVOAIE ILINCA-ROXANA	10,3
BUHĂIANU ALINA	13,7
CIUBOTARIU DANIEL	9,3
CONSTANTINICĂ OANA	14,3
CORMEI ANDREI	9,5
COZACILIC IRINA	14,6
CRETU IONELA	9,5
DRUC ALIN	10,8
HLIBOCIANU MIHAELA- RAMONA	8,1
ISĂILA LĂCRĂMIOARA	8,0
PASTOCACHE STEFAN	13,3
STĂNILĂ IULIANA	8,6
TĂTĂRĂSANU MARIUS- COSMIN	12,3
VÂRTICOSU MIRELA	4,1
VIZILIU CRĂITA-MIHAELA	10,1

\*Excusez-moi pour l'orthographe des noms.

Gilles Frapper