

3.00 crédits	22.5 h + 22.5 h	Q2
--------------	-----------------	----

Enseignants	Gaigneaux Eric (coordinateur(trice)) ;Gonze Xavier ;
Langue d'enseignement	Français > English-friendly
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Préalables	<i>Le(s) prérequis de cette Unité d'enseignement (UE) sont précisés à la fin de cette fiche, en regard des programmes/formations qui proposent cette UE.</i>
Thèmes abordés	Thèmes abordés : <ul style="list-style-type: none"> · Mécanique quantique des atomes et des molécules : introduction au formalisme de la mécanique quantique, structure des atomes et des molécules, nature de la liaison chimique. · Spectroscopie : principe des différents grands types de spectroscopie dans le cadre de la chimie.
Acquis d'apprentissage	<p>A la fin de cette unité d'enseignement, l'étudiant est capable de :</p> <p>AA : Au terme du cours LBIR1340, l'étudiant sera capable de :</p> <ul style="list-style-type: none"> · d'énoncer et d'expliquer les concepts de base de la mécanique quantique, et d'appliquer ces concepts aux atomes et aux molécules diatomiques; · d'énoncer et d'expliquer les caractéristiques fondamentales des valeurs et fonctions propres de l'équation de Schrödinger pour une série de potentiels simples et d'utiliser la séparation des variables pour analyser le cas à plusieurs variables; · d'expliquer la constitution du tableau périodique des éléments et la formation des orbitales moléculaires et de la liaison chimique de molécules diatomiques, à partir d'orbitales atomiques ; · de résoudre des problèmes simples liés aux calculs de valeurs moyennes d'opérateurs, de densité de probabilité, de spectres d'absorption et d'émission, d'énergie de formation et d'états excités (électroniques, vibrationnels ou rotationnels) de systèmes atomiques et moléculaires ; <p>1</p> <ul style="list-style-type: none"> · de distinguer les spectroscopies d'absorption et d'émission ; · d'associer le spectre d'un composé donné à la technique spectroscopique l'ayant généré et en retirer les informations utiles ; · de prédire l'allure générale (nombre de pics, distance entre les pics, gamme d'énergie) du spectre attendu pour un échantillon analysé en spectroscopies rotationnelle, vibrationnelles, des photoélectrons X (XPS), et de résonance magnétique (essentiellement paramagnétique électronique, RPE), et lorsqu'il y a lieu l'impact (déplacement de pic) d'un changement isotopique subi par l'échantillon ; · de corrélérer la différence de position d'un pic entre deux échantillons proches et leurs propriétés respectives, telles que la longueur d'une liaison (spectroscopie de rotation), la force d'une liaison (IR, Raman), la nature de la liaison (UV-Vis), l'étage d'oxydation des éléments (XPS), etc. <p>Les acquis d'apprentissage de l'activité contribuent au référentiel de compétences du programme pour les points suivants : B1.3, B1.5, B3.5 et B3.6.</p>
Modes d'évaluation des acquis des étudiants	<p>Lors de l'examen écrit, lequel est à livre fermé, plusieurs questions de connaissance et problèmes sont présentés aux étudiants. Les étudiants démontrent leurs connaissances en énonçant et expliquant le contenu correspondant du socle de savoirs, et leur capacité à résoudre ces problèmes en les résolvant et en expliquant leur démarche. Pour la spectroscopie, plus spécifiquement, des exercices chiffrés visant l'exploitation des caractéristiques d'un spectre pour déduire les caractéristiques de l'échantillon l'ayant généré (et vice versa) : prédiction de l'allure d'un spectre à partir des caractéristiques d'un échantillon) sont en outre présentés. La reconnaissance d'une technique spectroscopique utilisée pour générer le spectre d'un échantillon est aussi un pilier de l'évaluation. Typiquement la cote globale est constituée sur 30 points dont 20 portant sur la mécanique quantique et 10 sur la spectroscopie, avant d'être ramenée sur 20 points.</p>
Méthodes d'enseignement	Cours magistraux et séances d'exercices dirigées.
Contenu	Introduction à la mécanique quantique (14 h + 12 h): Bases expérimentales et théoriques. Résolution de l'équation de Schrödinger pour des cas simples, à une particule (puit de potentiel, oscillateur harmonique, rotateur rigide,

	<p>atomes hydrogénoïdes). Traitement approximatif: atomes polyélectroniques, ion moléculaire H_2^+, molécules diatomiques. Dynamique moléculaire et notion de liaison chimique.</p> <p>Fondements de spectroscopie (10 h + 8h) : distinctions entre spectroscopie et spectrométrie, spectroscopies d'absorption et d'émission, fondements des spectroscopies de rotation, vibration, libration, Raman de rotation et de vibration, UVVis, XPS, techniques de résonance (essentiellement RPE).</p>
Ressources en ligne	Les supports de cours (slides) sont disponibles sur le moodle du cours.
Bibliographie	<ul style="list-style-type: none"> • Notes de cours (syllabus) disponibles sur le moodle. <p>Le cours ne fait appel à aucun support particulier qui serait payant et jugé obligatoire. Les ouvrages payants qui seraient éventuellement recommandés le sont à titre facultatif.</p>
Faculté ou entité en charge:	AGRO

Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)				
Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Bachelier en sciences de l'ingénieur, orientation bioingénieur	BIR1BA	3	LBIR1211 ET LBIR1221	