UCLouvain

lchm1252

2023

Eléments de chimie physique moléculaire

6.00 crédits	45.0 h + 22.5 h	Q2

Enseignants	de Wergifosse Marc ;
Langue d'enseignement	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Thèmes abordés	Le cours porte sur la compréhension, utilisant les principes premiers de la physique, du comportement électronique des atomes et molécules et son lien avec la chimie. Il aborde aussi la compréhension des mouvements atomiques dans les molécules (rotations, vibrations). Pour ce faire, le cours comporte une présentation des bases nécessaires de mécanique quantique pour le chimiste.
Acquis d'apprentissage	**A la fin de cette unité d'enseignement, l'étudiant est capable de :** 1 Ce cours, destiné aux étudiants en chimie, propose une introduction à l'aspect microscopique du monde atomique et moléculaire. Il présente les notions de structure électronique des atomes et molécules, de structure géométrique des molécules et des mouvements moléculaires en vue de les intégrer à l'étude des propriétés moléculaires et à la réactivité chimique : une insistance toute particulière sera faite sur le caractère discret des niveaux d'énergie, leur calcul et leur signification ainsi que sur la description des molécules individuelles. Ce cours doit servir d'introduction au cours de spectroscopie moléculaire, à la thermodynamique statistique et à la chimie quantique. Il introduit la terminologie et les concepts d'usage en chimie organique et inorganique.
Modes d'évaluation des acquis des étudiants	Les interrogations d'exercices comptent pour 15% de la cote finale. Le rapport de laboratoire compte pour 5% de la cote finale. Les étudiants seront évalués par un examen (80% de la cote finale) en deux parties: écrit à livre fermé et oral.
Méthodes d'enseignement	Cours magistraux interactifs avec séances optionnelles de questions/réponses. Des séances d'exercices obligatoires ainsi qu'un laboratoire obligatoire sont organisés pour faciliter la compréhension des étudiants. Excepté pour la première séance, à chaque séance d'exercice, une petite interrogation de 15 minutes est organisée sur la matière de la séance précédente. Un rapport sera demandé pour la séance de laboratoire.
Contenu	**Chapitre 0: Rappel de mathématiques** 1. Nombres complexes 2. Vecteurs et matrices 3. Equations différentielles **Chapitre 1: Les origines de la mécanique quantique** 1. Introduction 2. Origines de la mécanique quantique 3. Le rayonnement du corps noir 4. L'effet photoélectrique 5. L'effet Compton 6. Le spectre atomique de l'hydrogène 7. Le modèle de Bohr 8. Dualité onde/corpuscule **Chapitre 2: Les fondements de la mécanique quantique** 1. Les opérateurs en mécanique quantique 2. Les postulats de la mécanique quantique 3. Les caractéristiques et évolution des états **Chapitre 3: Mouvements linéaires** 1. Les caractéristiques des fonctions d'ondes 2. Remarques générales sur l'équation de Schrödinger

3. Mouvements linéaires de translation
    - Une particule libre dans un système unidimensionnel
    - Pénétration au travers d'une barrière d'énergie potentielle
    - Une particule dans une boite
4. Mouvements linéaires
    - L'oscillateur harmonique
    - L'oscillateur harmonique pour une molécule diatomique

Chapitre 4: Rotations

1. Rotation d'une particule sur un cercle
2. Rotation d'une particule sur une sphère
3. Le rotateur rigide comme modèle pour la rotation d'une molécule diatomique
4. Le moment angulaire (moment cinétique)

Chapitre 5: L'atome d'hydrogène

1. Mouvement d'un électron dans un potentiel Coulombien
2. Les orbitales atomiques mono-électroniques
3. Retour au moment angulaire (moment cinétique)

Chapitre 6: Techniques d'approximation

1. Théorie des perturbations indépendantes du temps
2. Méthode des variations

Chapitre 7: L'atome d'Hélium et le spin

1. L'atome d'Hélium
2. Le spin
3. Le spin et l'Hélium
4. Produit de Hartree
5. Les déterminants de Slater

Chapitre 8: Les atomes polyélectroniques et la méthode Hartree-Fock

1. Les atomes polyélectroniques
2. Les orbitales atomiques de Slater
3. Méthode Hartree-Fock
4. Théorie des perturbations dépendantes du temps
5. Spectres atomiques
6. Notation spectroscopique d'une configuration électronique
7. Règles de Hund pour déterminer le terme atomique de l'état fondamentale
8. Règles de sélections pour les atomes polyélectroniques

Chapitre 9: Introduction à la structure moléculaire

1. L'approximation de Born-Oppenheimer
2. L'ion H2+
3. La théorie des orbitales moléculaires
4. La molécule de dihydrogène
5. Les molécules diatomiques
6. Le terme électronique d'un état électronique d'une molécule diatomique
7. Etats excités des molécules diatomiques
8. Théorie des orbitales moléculaires pour les molécules polyatomiques
9. Pourquoi la molécule de BeH2 est linéaire et la molécule de H2O coudée?
10. Quelques mots sur la méthode de Hückel

Chapitre 10: Interaction des molécules avec la lumière

1. Rappel: Théorie des perturbations dépendantes du temps
2. Règles de sélection pour l'absorption et l'émission
3. Spectroscopie électronique
4. Spectroscopie vibrationnelle des molécules diatomiques
5. Spectroscopie vibrationnelle des molécules polyatomiques

Ressources en ligne	site moodle : https://MOODLE.UCLOUVAIN.BE
Autres infos	La compréhension de cette unité d'enseignement demande un travail hebdomadaire de la part de l'étudiant car les concepts sont construits au fur et à mesure du cours. La présence au cours est donc très fortement conseillée.
Faculté ou entité en charge:	CHIM

Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)

Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Bachelier en sciences chimiques	CHIM1BA	6		