UCL Université catholique de Louvain

LCHM1353

2015-2016

Chimie quantique

3.0 crédits	22.5 h + 7.5 h	1q

Enseignants:	Hautier Geoffroy ;
Langue d'enseignement:	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Thèmes abordés :	Initiation des étudiants en chimie au formalisme de la chimie quantique. Présentation des méthodes mono et poly configurationnelles suivi de leur utilisation dans le calcul des propriétés moléculaires structurales, électroniques et énergétique et dans la détermination des mécanismes réactionnels.
Acquis d'apprentissage	Ce cours est destiné à initier les étudiants en chimie aux notions élémentaires de chimie quantique et à leur application aux problèmes rencontrés par les chimistes. Il ne se limite pas à un enseignement formel, mais inclura également une initiation à la pratique de la discipline. *La contribution de cette UE au développement et à la maîtrise des compétences et acquis du (des) programme(s) est accessible à la fin de cette fiche, dans la partie « Programmes/formations proposant cette unité d'enseignement (UE) ».*
Contenu :	Contenu : Le cours s'articule autour de trois parties : Les méthodes introduisent les concepts et méthodes couramment utilisés dans le domaine de la modélisation des phénomènes chimiques par l'approche de la chimie quantique. Après une brève présentation du formalisme, les mots-clefs seront: Modèle orbitalaire et méthode de Hartree-Fock; développement en orbitales atomiques et la méthode de Roothaan ; propriétés moléculaires. Les applications, en partant de la description d'une molécule isolée, introduisent la notion de structure moléculaire en relation avec la surface d'énergie potentielle. On montre comment à partir de la surface, on peut: obtenir une géométrie moléculaire, explorer les divers isomères et conformères, évaluer le coût énergétique d'une modification de la structure moléculaire (isomérisation par exemple). Etude de cas. Un exemple, choisi avec les étudiants, est traité in extenso. On montre comment au moyen des programmes de simulation, on peut, pour un système donné, rechercher et caractériser une structure moléculaire, calculer ses propriétés moléculaires (densité électronique, distribution de charge, dipôle,), décrire les réarrangements du squelette moléculaire vers d'autres structures, évaluer les effets de substituant, Méthode d'enseignement et apprentissage : Le cours comprend des exposés théoriques suivis d'étude de cas concrets recourant aux logiciels de simulation et au calcul sur ordinateur.
Autres infos :	Pré-requis : - Notions de base de chimie générale, organique et inorganique (cours de 1è et 2è années du baccalauréat). - Chimie physique moléculaire (CHM 1252) Mode d'évaluation : - Examen écrit
Faculté ou entité en charge:	CHIM

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

Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Master [120] en sciences chimiques	CHIM2M	3	-	
Master [60] en sciences chimiques	CHIM2M1	3	-	
Approfondissement en sciences chimiques	LCHIM100P	3	-	