

4.0 crédits	30.0 h + 22.5 h	2q
-------------	-----------------	----

Enseignants:	Gaigneaux Eric (coordinateur) ; Gonze Xavier ; Hautier Geoffroy (supplée Gonze Xavier) ;
Langue d'enseignement:	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Ressources en ligne:	Icampus
Préalables :	LBIR1200 Mathématiques générales II (ou un cours équivalent) LBIR1210 Physique générale (II) (ou un cours équivalent) <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 :	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. Contribution de l'activité au référentiel AA (AA du programme) LBIR1314 contribue aux acquis d'apprentissage B1.3, B1.5, B3.5 et B3.6 du référentiel AA: connaissance et compréhension d'un socle de savoirs en approfondissement en chimie, plus spécifiquement, la chimie physique ; mobilisation de ses savoirs face à un problème simple ; analyser et interpréter les résultats jusqu'à la critique argumentée, pour une question scientifique bien délimitée ; faire preuve d'un esprit de synthèse et formuler des conclusions pour une question scientifique bien délimitée.</p> <p>b. Formulation spécifique pour cette activité des AA du programme (maximum 10) A la fin de cette activité, l'étudiant est capable :</p> <ul style="list-style-type: none"> - d'énoncer et d'expliquer les concepts de base de la mécanique quantique, d'en démontrer certaines relations mathématiques fondamentales, 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 ; - 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 spectroscopie de rotation, vibration, libration, Raman, XPS, RPE, RMN, et lorsqu'il y a lieu l'impact (déplacement de pic) d'un changement isotopique subi par l'échantillon ; - de corréler 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><i>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) ».</i></p>
Modes d'évaluation des acquis des étudiants :	Lors de l'examen écrit, 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.
Méthodes d'enseignement :	Cours magistraux et séances d'exercices dirigées.
Contenu :	Table des matières : Introduction à la mécanique quantique (20h): Equation de Schroedinger et résolution de la particule dans un puit de potentiel (boîte, oscillateur harmonique, rotateur rigide, atomes hydrogénoïdes). Généralisation aux atomes polyélectroniques, ion moléculaire H ₂ ⁺ , molécule d'hydrogène et diatomiques en décrivant les mouvements moléculaires et la notion de liaison chimique. Fondements de spectroscopie (10h) : distinctions entre spectroscopie et spectrométrie, spectroscopies

	d'absorption et d'émission, fondements des spectroscopies de rotation, vibration, libration, Raman de rotation et de vibration, UV-Vis, XPS, RPE et RMN.
Bibliographie :	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.
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	4	LBIR1200 et LBIR1210	