

6 crédits	45.0 h + 22.5 h	Q2
-----------	-----------------	----

Enseignants	Hautier Geoffroy ;
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	<p>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.</p> <p>1</p> <p>-----</p> <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	Les étudiants seront évalués principalement par un examen écrit suivi d'un examen oral. Une part de l'évaluation viendra aussi d'une série de devoirs à effectuer pendant le quadrimestre.
Contenu	<p>- Eléments de mécanique quantique :</p> <p>Historique, fondements, concepts de base, postulats et opérateurs en mécanique quantique, résolution de systèmes simples. Equation de Schrödinger.</p> <p>-Atome d'hydrogène</p> <p>-Méthodes approximatives (théorème des variations et approches perturbatives)</p> <p>-Atomes d'He et autres atomes multi-électroniques. Notion de spin, d'indiscernabilité et d'anti-symétrie.</p> <p>-Equations d'Hartree-Fock</p> <p>-Approximation de Born-Oppenheimer. Molécules diatomiques et poly-atomiques. Théorie des orbitales moléculaires.</p> <p>-Approche quantique des vibrations et rotations dans des molécules diatomiques et polyatomiques.</p> <p>-Interaction avec la lumière de molécules et atomes. Règles de sélection.</p>
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		