



[45h+22.5h exercices] 5 crédits

Cette activité se déroule pendant le 2ème semestre

Enseignant(s): Daniel Peeters
Langue d'enseignement : français
Niveau : cours de 1er cycle

Objectifs (en terme de compétences)

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.

Objet de l'activité (principaux thèmes à aborder)

- Structure moléculaire et description des mouvements internes.

Sur bases des éléments de mécanique analytique lagrangienne : Introduction des coordonnées de structure, applications aux vibrations moléculaires et déduction des modes normaux de vibration ; Introduction aux principes de la mécanique moléculaire, aux champs de force et à leurs applications à la chimie, notamment à l'analyse conformationnelle.

- Eléments de mécanique quantique :

Fondements, concepts de base, postulats et opérateurs en mécanique quantique, résolution de systèmes simples.

- Chimie Physique moléculaire théorique :

Application de l'équation de Schrödinger à des systèmes polyélectroniques : Notion de spin et principe d'antisymétrie ;

Introduction au modèle en couches : De la loi de Coulomb à la structure électronique et géométrique ; Du modèle indépendant à Hartree-Fock ;

Orbitales atomiques, configuration électronique, multiplicité et termes atomiques.

Orbitale moléculaire, la méthode LCAO-MO, notion de configuration électronique, les orbitales hybrides.

- Introduction aux méthodes de la chimie quantique et à leur terminologie :

Les méthodes de Hoffmann, Hückel, xxDO, ab initio, etc. ;

Les propriétés chimiques: potentiel d'ionisation, affinité électronique, électronégativité, énergie de résonance ;

Les méthodes dites des orbitales frontières et leurs applications, principe de conservation de la symétrie des orbitales moléculaires et réactivité chimique ;

Structure géométrique et électronique des molécules, ions et radicaux.

Les exercices porteront sur les aspects moléculaires et plus particulièrement dans les domaines des mouvements rotation et vibration, de la mécanique moléculaire, de la description de composés chimiques simples, des systèmes pi et orbitales frontières. L'objectif poursuivi étant la mise en pratique et la concrétisation des différentes notions théoriques. Le recours aux logiciels courants de représentation moléculaire est demandé.

Une coordination étroite avec les cours de cristallographie et de spectroscopie moléculaire est nécessaire.

Résumé : Contenu et Méthodes

Après l'introduction d'une description classique des mouvements moléculaires basée sur la notion de modes normaux, la limitation de la mécanique classique est mise en évidence. Les concepts de base et postulats de la mécanique quantique sont présentés. L'équation de Schroedinger et sa résolution dans les cas simples sont abordées en vue de résoudre la structure des atomes et des molécules. La structure moléculaire est introduite et les différents mouvements moléculaires sont décrits. La nature quantique de la liaison chimique est discutée. L'hybridation des atomes, la séparation sigma pi, la nature de la distribution électronique sont présentées en fonction de la structure moléculaire.

Méthode d'enseignement et apprentissage: des exposés théoriques sont proposés et suivis d'exemples traités lors de séances d'exercices.

Autres informations (Pré-requis, Evaluation, Support, ...)

Pré-requis : Cours de chimie générale et de physique générale.

Evaluation : Examen écrit

Support : Notes de cours et ouvrages de référence. Les exercices sont réalisés avec l'aide de logiciels généraux (tableurs) et spécifiques (Matlab, ChemPro,...).

Autres crédits de l'activité dans les programmes

CHIM12	Deuxième candidature en sciences chimiques	(5 crédits)	Obligatoire
---------------	--------------------------------------------	-------------	-------------