



SC

CHIM2181 Chimie quantique I

[22.5h+0h exercices] 2.5 crédits

Cette activité se déroule pendant le 1er semestre

**Enseignant(s):** Daniel Peeters  
**Langue d'enseignement :** français  
**Niveau :** cours de 2ème cycle

### Objectifs (en terme de compétences)

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.

### Objet de l'activité (principaux thèmes à aborder)

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.

### Résumé : Contenu et Méthodes

RésuméLe 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 apprentissageLe cours comprend des exposés théoriques suivis d#étude de cas concrets recourant aux logiciels de simulation et au calcul sur ordinateur

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

Pré-requis : Chimie générale et les bases de la chimie physique moléculaire (CHIM 1180)Mode d#évaluation : Examen écritSupport : Structure détaillée du cours + ouvrages de référence

### Autres crédits de l'activité dans les programmes

CHIM21	Première licence en sciences chimiques	(2.5 crédits)
CHIM22	Deuxième licence en sciences chimiques	(2.5 crédits)