



[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 développer des aspects modernes de la chimie physique en reliant les théories microscopiques et macroscopiques. Il veillera à ouvrir l'esprit des étudiants aux aspects les plus récents des sciences moléculaires et aux nouveaux concepts qui s'y développent. En particulier, il servira d'approfondissement aux notions de propriétés moléculaires, interactions moléculaires et interactions champ - matière.

Objet de l'activité (principaux thèmes à aborder)

Etude des concepts généraux et aspects pratiques des propriétés moléculaires menant notamment aux réponses moléculaires dans les champs électriques et magnétiques, à l'électronique des polymères, aux interactions champ matière et aux interactions intermoléculaires.

Résumé : Contenu et Méthodes

Résumé

Le cours est constitué d'un ensemble de chapitres qui traitent chacun d'un thème choisi. L'importance attribuée aux différents chapitres est modulable en fonction de l'intérêt du groupe :: La Structure électronique et les propriétés conductrices des polymères décrivent les notions de bande de valence, de conduction et interdite; largeur de bande et niveau de Fermi; cellule unité monomérique. La nature de la conduction dans les polymères est étudiée en développant les notions de soliton et paire soliton/antisoliton; de polaron et bipolaron; l'incidence du dopage. Différents exemples de polymères organiques conducteurs. (Polyacétylène, Polythiophène#, Polyaniline#) sont discutés. Les propriétés moléculaires sont introduites en partant de la description d'une molécule isolée placée dans un champ. L'expression du potentiel d'interaction introduit les multipôles et la théorie des perturbations permet d'obtenir les moments (dipolaire, quadripolaire, octo#), les termes de polarisabilités électriques, hyperpolarisabilité,# ainsi que d'autres propriétés du premier ordre et du second ordre observables en spectroscopie. Les interactions intermoléculaires sont présentées en étudiant une molécule dans le champ d'une autre molécule. On fait apparaître ainsi l'énergie d'interaction électrostatique associée au développement multipolaire et par la suite l'énergie de dispersion. . La Relation entre propriétés microscopiques et grandeurs macroscopiques est abordée dans quelques cas : La constante diélectrique, l'effet SHG, le phénomène d'absorption de lumière (molécules dans un bain d'ondes électromagnétiques, les coefficients d'Einstein, l'intensité de l'absorption et l'interprétation du coefficient d'extinction; #).
Méthode d'enseignement et apprentissage
Le cours comprend des exposés théoriques.

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

Pré-requis : Notions de base de chimie physique enseignée en 1ère licence

Mode d'évaluation : Examen écrit

Support : Plan détaillé du cours + ouvrages de référence

Autres crédits de l'activité dans les programmes

CHIM22

Deuxième licence en sciences chimiques

(2.5 crédits)