



## CHM1252 Eléments de chimie physique moléculaire

[45h+22.5h exercices] 6 crédits

**Enseignant(s):** Daniel Peeters  
**Langue d'enseignement :** français  
**Niveau :** Premier cycle

### Objectifs (en termes 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.

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

<b>CHIM12BA</b>	Deuxième année de bachelier en sciences chimiques	(6 crédits)	Obligatoire
-----------------	---	-------------	-------------