



CHIM3240 Modélisation des phénomènes chimiques

[22.5h] 2.5 crédits

Ce cours bisannuel est dispensé en 2006-2007, 2008-2009,...

Enseignant(s): Daniel Peeters (coord.)

Langue d'enseignement : français

Niveau : Troisième cycle

Objectifs (en termes de compétences)

Enseignement de troisième cycle à périodicité bisannuelle visant à familiariser l'étudiant avec la notion de modèle dans ses aspects de conception, utilisation et limitation.

Objet de l'activité (principaux thèmes à aborder)

Le contenu de cet enseignement diffèrera d'année en année et permettra d'aborder les aspects suivants :- Définition d'un modèle et précision de son domaine d'application. Les aspects physiques et chimiques seront clairement séparés de l'aspect mathématique et formel du modèle.- Présentation et discussion de quelques modèles d'intérêt chimique: Modèles moléculaires et mécanique moléculaire; modèles de réactivité et dynamique moléculaire; autres aspects de la modélisation (diffusion, électrostatique,). - Limitation et critique des modèles. Evaluation de l'adéquation du modèle.- Utilisation et intérêt des modèles.

Résumé : Contenu et Méthodes

Titre : " Physico-chimie des systèmes inorganiques et organométalliques : Aspects théoriques et expérimentaux "

Contenu du cours:

L'enseignement de la première partie (2 jours) porte sur les méthodes de la chimie théorique dans une perspective d'accueil de participants intéressés par l'emploi de ces méthodes aux composés inorganiques et à leurs complexes.

L'enseignement de la seconde partie porte sur des domaines d'applications spécifiques au thème retenu.

1. Rappels introductifs à la chimie quantique (7h.) J. Cornil (UMH), B. Champagne (FNDDP), D. Beljonne (UMH)

- Rappel des principes de mécanique quantique, équation de Schrödinger, fonctions d'onde

- Obtention de l'énergie électronique des molécules dans l'état fondamental, excité et ionisé : calculs " ab initio ", méthodes et bases atomiques, propriétés thermodynamiques.

2. Traitement Théorique des Atomes lourds (3h.) M. Godefroid (ULB)

- Formalisme général de l'étude des atomes.

- Incidence des effets relativistes

3. Les potentiels effectifs de Coeur (4h) H. Stoll (Stuttgart)

- Définition et contexte : Formulation du Hamiltonien et Obtention des ECP

- Les ECP Relativistes.

- Traitement du couplage spin orbite

4. L'étude des solides inorganiques (3h) X. Gonze (UCL)

- L'approche théorique des matériaux solides et de leurs propriétés

- Application de la DFT en ondes planes au cas des solides inorganiques

5. Propriétés catalytiques des complexes organométalliques (2h) O. Riant (UCL)

6. Photophysique et biomarqueurs de complexes organométalliques (2h) F. Kirsch (ULB)

7. La réactivité de complexes de Ruthénium (3h) Ch. Daniel (Strasbourg)

8. La Synergie Théorie/Expérience en chimie des organométalliques (4h) J. Harvey (Univ. Bristol).

9. L'approche orbitale des complexes de coordination (4h) Y. Jean (Paris Sud)

10. Approche QM/MM des réactions catalytiques (3h) T. Leyssens (UCL- MPI Mülheim).