



<b>DESCRIPTIF DU COURS</b>	
Objectif	Dans ce cours, l'étudiant sera initié aux principes généraux de la mécanique quantique appliquée à la chimie. En faisant appel à ces principes, il apprendra à construire les fonctions d'état et les opérateurs associés aux grandeurs observables d'un système atomique ou moléculaire, et à les utiliser pour décrire les propriétés physico-chimiques de ces systèmes
Type Unité Enseignement	UEF1
Contenu succinct	<p>1. Les orbitales atomiques aux orbitales moléculaires</p> <p>1.1 introduction</p> <p>1.2 principes de quantification</p> <p>1.3 onde plane à une dimension</p> <p>1.4 l'atome de Bohr</p> <p>1.5 résolution de l'équation de Schrödinger pour un atome hydrogénéoïde</p> <p>1.6 fonctions d'onde hydrogénéoïdes : nombres n, l, m</p> <p>1.7 forme mathématique des fonctions d'onde : le concept d'orbitale atomique (OA)</p> <p>1.8 orbitales atomiques des atomes réels et l'ion moléculaire H<sub>2</sub><sup>+</sup></p> <p>2. La méthode de Hückel appliquée aux orbitales moléculaires</p> <p>2.1 Obtention de la fonction d'onde d'une molécule : orbitales moléculaires (OM).</p> <p>2.2 Représentation graphique du recouvrement</p> <p>2.3 Intégrales de résonance H<sub>ik</sub></p> <p>2.4 Résolution dans le cas général</p> <p>2.5 Energies et fonctions d'onde associées pour la molécule H<sub>2</sub></p> <p>2.6 Méthode de Hückel généralisée et méthode de Hückel dite « simple »</p> <p>2.7 Rôle fondamental de la symétrie</p> <p>3. - Molécules poly atomiques</p> <p>3.1. Introduction aux calculs quanto-chimiques.</p> <p>3.2. Orbitales canoniques et leurs transformations.</p> <p>3.3. Orbitales hybrides et géométrie moléculaire.</p> <p>3.4. Système de liaisons conjuguées: méthode de Hückel.</p> <p>3.5. Propriété de symétrie des intégrales</p> <p>3.6. Modèle de Hückel étendu</p> <p>4. Vibrations moléculaires</p> <p>DC/U.TIARET/BP 78 Zaaroura 14000-TIARET- E-Mail:departementchimie14@gmail.com</p> <p>Etablissement : Université Ibn Khaldoun, Tiaret</p> <p>Intitulé du master : Chimie des Matériaux Page 31</p> <p>Année universitaire : 2016-2017</p> <p>4.1 Calcul et symétrie des modes vibratoires normaux</p> <p>4.2 Détermination des types de symétrie des modes normaux</p> <p>4.3 Réactivité chimique</p> <p>5. Méthodes de calculs</p> <p>5.1 Optimisation géométriques</p> <p>5.2 Calcul par semi empirique</p> <p>5.3 Calcul par ab initio: DFT et HF</p>
Crédits de la matière	6
Coefficient de la matière	3
Pondération Participation	99%
Pondération Assiduité	99%

Calcul Moyenne C.C	Continu : 40%
Compétences visées	

EVALUATION DES CONTROLES CONTINUS DE CONNAISSANCES							
PREMIER CONTROLE DE CONNAISSANCES							
Jour	Séance	Durée	Type (1)	Doc autorisé (Oui, Non)	Barème	Echange après évaluation (date Consult. copie)	Critères évaluation (2)
lundi		1h	E	non	07/07	20/03/2023	R
DEUXIEME CONTROLE DE CONNAISSANCES							
Jour	Séance	Durée	Type (1)	Doc autorisé (Oui, Non)	Barème	Echange après évaluation (date consultation copies)	Critères évaluation (2)
						Cliquez ici pour entrer une date.	

(1) Type : E=écrit, EI=exposé individuel, EC=exposé en classe, EX=expérimentation, QCM

(2) Critères évaluation : A=Analyse, S=synthèse, AR=argumentation, D=démarche, R=résultats

EQUIPEMENTS ET MATERIELS UTILISES	
Adresses Plateformes	
Noms Applications (Web, réseau local)	
Photocopiés	
Matériels de laboratoires	
Matériels de protection	
Matériels de sorties sur le terrain	

<b>LES ATTENTES</b>
---------------------

Attendues des étudiants (Participation-implication)	PARTICIPATIONS
Attentes de l'enseignant	BON

BIBLIOGRAPHIE	
Livres et ressources numériques	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Introduction à la chimie quantique, Claude Leforestier. Editeur: Dunod.</li> <li>- Chimie quantique, exercices et problèmes résolus, C. Millot, X. Assfeld.</li> <li>- Physique moderne, Théorie et problèmes, R.Gautreau, W.Savin.</li> <li>- Quantum Theory of Molecular and Solids. Vol. 4: The Self-Consistent Field for Molecular and Solids (McGraw-Hill, New York, 1974). J.C. Slater</li> <li>- Molecular structure description. (1999). L.B.Kier et L.H.Hall</li> <li>- Liaisons intermoléculaires.(1995). A.Gershel</li> <li>- Panorama des liaisons chimiques. (1997). P. Grange</li> </ul>
Articles	
Polycopiés	
Sites Web	

