

PLAN DE COURS

CHM-10098 STRUCTURE MOLÉCULAIRE (3 crédits)

Responsable

Gérard Charlet bureau 1084D, pavillon A. Vachon. Tel: 656 5113
Courrier électronique: Gerard.Charlet@chm.ulaval.ca

Site Internet du cours

Un site d'appui au cours est offert dans l'environnement *WebCT*, à l'adresse: <http://www.webct.ulaval.ca/>

Horaire

le mardi de 18h30 à 20h20, salle 2880, pavillon A. Vachon,
le vendredi de 10h30 à 12h20, salle 2880, pavillon A. Vachon,
du mardi 3 septembre au vendredi 13 décembre 2002.

Il n'y a pas de cours le lundi 14 octobre (congé de l'Action de grâce), du lundi 28 octobre au vendredi 1^{er} novembre (semaine de lecture) et le vendredi 6 décembre.

Objectifs:

Au terme du cours, l'étudiant(e) sera capable de:

- donner la définition des termes: numéro atomique, fonction d'onde, orbitale atomique, orbitale moléculaire, configuration électronique, couche de valence, état fondamental, état excité, énergie d'ionisation, électronégativité, polarité de liaison, moment dipolaire, moment dipolaire induit, polarisabilité, forces de Van der Waals;
- décrire l'effet photoélectrique et expliquer comment il prouve que l'énergie d'une onde électromagnétique est quantifiée;
- décrire ce qu'est le spectre de raies d'un atome et expliquer comment il prouve que l'énergie d'un atome est quantifiée;
- décrire les observations expérimentales qui mettent en évidence la dualité onde-corpuscule de la matière;
- décrire la signification de la relation de De Broglie;
- décrire le modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène;
- énoncer les résultats du modèle de la particule dans une boîte et les utiliser dans la résolution de problèmes;
- décrire le modèle ondulatoire de l'atome;
- décrire les règles de remplissage des orbitales atomiques et leur conséquences sur la construction du tableau de la classification périodique des éléments;
- établir la correspondance entre la configuration électronique d'un élément et sa place dans le tableau de la classification périodique des éléments;
- représenter la configuration électronique d'un atome ou d'un ion;
- décrire et expliquer l'évolution du rayon atomique et de l'électronégativité d'un élément en fonction de sa position dans le tableau de la classification périodique;
- énoncer le principe de la méthode de combinaison linéaire des orbitales atomiques (LCAO);
- décrire les modes de recouvrement des orbitales atomiques;
- décrire la densité électronique associée aux orbitales atomiques *s* et *p*, aux orbitales moléculaires σ et π ;
- Décrire la différence de densité électronique et d'énergie entre l'orbitale liante et l'orbitale anti-liante qui résultent de la combinaison linéaire de deux orbitales atomiques;

- déterminer la configuration électronique de molécules diatomiques, à l'aide de leur diagramme d'énergies orbitales;
- classer des molécules par ordre de moment dipolaire;
- calculer le moment dipolaire d'une molécule, à partir des moments dipolaires de liaison;
- calculer le moment dipolaire et la polarisabilité d'une molécule, à partir de mesures de constante diélectrique;
- décrire les forces intermoléculaires et leur rôle dans la condensation des gaz en liquides et solides;

Place du cours dans le programme d'études

Le cours entre dans la composition des programmes de baccalauréat en chimie, biochimie, sciences et technologies des aliments (STA), et en enseignement secondaire (voies mathématiques et sciences et technologie) (BES).

Contenu

1. Rappels

- 1.1 Méthode scientifique: observations expérimentales - théories et modèles
- 1.2 Grandeurs mesurables - Dimensions et unités
- 1.3 Rappels de mécanique classique
- 1.4 Rappels d'électrostatique
- 1.5 Rappels d'électromagnétisme
- 1.6 Ondes périodiques
- 1.7 Ondes électromagnétiques
- 1.8 Premiers modèles de l'atome

2. Atome d'hydrogène: modèle classique

- 2.1 Effet photoélectrique
- 2.2 Spectre de raies - Rayonnement du corps noir
- 2.3 Modèle de Bohr

3. Atome d'hydrogène: modèle ondulatoire

- 3.1 Propriétés ondulatoires de l'électron
- 3.2 Mécanique quantique - Équation de Schrödinger

4. Atomes polyélectroniques

- 4.1 Organisation électroniques des atomes
- 4.2 Périodicité des propriétés des éléments

5. Liaison chimique

- 5.1 Modèle de Lewis - Modèle VSEPR
- 5.2 Modèle ondulatoire
 - 5.2.1 Combinaison linéaire des orbitales atomiques (LCAO)
 - 5.2.2 Molécules diatomiques homo nucléaires - Ordre de liaison, énergie et longueur de liaison
 - 5.2.3 Molécules diatomiques hétéro nucléaires - Le cas de HF
 - 5.2.4 Molécules complexes - Hybridation
 - 5.2.5 Polarité de liaison - Caractère ionique - Moment dipolaire

6. Propriétés électriques des molécules

- 6.1 Condensateur plan - Constante diélectrique
- 6.2 Effet d'un champ électrique sur une molécule isolée - Dipôle permanent - Dipôle induit
- 6.3 Effet d'un champ électrique sur un gaz, un liquide ou une solution - Équation de Debye
- 6.4 Effet du champ électrique d'une onde électromagnétique - Indice de réfraction
- 6.5 Forces intermoléculaires

Outils de référence:

Le tableau de la classification périodique des éléments (Sargent-Welch) est obligatoire. Un volume de

référence est fortement recommandé. Pour les étudiants en chimie, le volume *Chimie physique* de Peter W. Atkins (éditeur: *DeBoeck Université*; année de publication: 2000; ISBN: 2-7-445-0027-5) est obligatoire ou recommandé pour d'autres cours du programme. Il s'agit de la traduction française de la 6^{ième} édition de *Physical Chemistry* (éditeur: W. H. Freeman; année de publication: 1998, ISBN: 0-7167-2871-0). L'édition originale anglaise est tout aussi acceptable que la traduction française. Pour les étudiants des autres programmes, le volume *Physical Chemistry for the Chemical and biological Sciences* de Raymond Chang (éditeur: *University Science Books*; année de publication: 2000; ISBN: 1-891389-06-8) est recommandé. Ces volumes sont disponibles à la librairie Zone, local 0128 du pavillon Adrien-Pouliot.

Par ailleurs, on peut consulter, à la réserve de la bibliothèque scientifique du premier cycle :

- P. W. Atkins, *Physical Chemistry*, 1^{ière} édition, W. H. Freeman, 1978 (QD 453.2 A874) et *Solution manual for physical chemistry* (QD 453.2 A8741);
- P. W. Atkins, *Chimie physique* (traduction de la 6^e éd. anglaise), 2000 (QD 453.2 A874 2000 F)
- R. Chang, *Physical Chemistry for the Chemical and biological Sciences*, 3^{ième} édition, 2000 (QD 453.2 C456 2000)
- P. W. Atkins, *Physical Chemistry*, 5th ed., W. H. Freeman, 1994 (QD 453.2 A874 1994);
- J. P. Bromberg, *Physical Chemistry et Solution Manual*, Allyn&Bacon, 1984 (QD 453.2 B868);
- I. Tinoco Jr., K. Sauer et J. C. Wang, *Physical Chemistry - Principles and Applications in Biological Sciences*, 2nd ed., Prentice-Hall, 1985 (QH 345 T591);
- P. W. Atkins, *Chimie Physique* (français), Vuibert, 1983 (QD453.2 A874 1983);
- G. M. Barrow, *Chimie Physique*, tomes 1 et 2 (français), Masson, 1976 (QD453.2 B278);
- Robert G. Mortimer, *Mathematics for Physical Chemistry*, 1981 (QD455.3 M888);
- James R. Barrante, *Applied mathematics for Physical Chemistry*, 1974 (QD455.3 M426 B268);
- Serway, Raymond A., *Physique* (3 volumes) *I Mécanique; II Électricité et magnétisme; III Optique et physique moderne*, 1996 (QC 23 S492).

Formules pédagogiques

L'enseignement a lieu en salle de cours lors de deux périodes hebdomadaires de 110 minutes. Il est essentiel de prendre des notes. La présentation est accompagnée d'exercices fréquents, à faire individuellement sur place. Il convient donc d'avoir en tout temps une calculatrice. Une partie du matériel du cours est offerte sur le site Internet. Au cours de la session, plusieurs quiz doivent être complétés en ligne sur le site Internet. Des devoirs, à faire à la maison, doivent être rendus une semaine après la distribution des énoncés. En moyenne, le cours exige cinq heures de travail personnel par semaine.

Mode d'évaluation

	Date	Durée	% de la note finale
Quiz	à quelques reprises durant la session		9
Devoirs	à quelques reprises durant la session		10
Premier examen	Vendredi 11 octobre	110 minutes	27
Deuxième examen	Vendredi 15 novembre	110 minutes	27
Troisième examen	Vendredi 13 décembre	110 minutes	27

Les examens se font sans livres ni notes de cours. Les seuls documents permis sont l'aide-mémoire fourni par le professeur et le tableau de la classification périodique des éléments. La note finale (A⁺, A, A⁻, B⁺, etc.) est attribuée à partir de la note numérique sur 100 selon le barème suivant:

E	D	D+	C-	C	C+	B-	B	B+	A-	A	A+
50	56	60	64	68	72	76	80	84	88	92	