



Plan de cours - session d'automne 2004

Sigle: CHM-10098

Nombre de crédits: 3

Responsable: François Dion, fdion2@chm.ulaval.ca, bureau 1207 et 1211, Pavillon Alexandre Vachon, Département de chimie, Faculté des sciences et de génie, Université Laval.

Horaire: le mardi de 18h30 à 20h20, salle 2880, pavillon A. Vachon
le vendredi de 10h30 à 12h20, salle 2880, pavillon A. Vachon

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;
- décrire l'effet photo-électrique 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 quantique 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 de l'énergie d'ionisation et de la taille d'un atome 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, et 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:

Comme l'indique la [description officielle du cours](#), celui-ci entre dans la composition des programmes de [baccalauréat en chimie](#), [biochimie](#), [sciences et technologies des aliments](#) (STA), et en enseignement secondaire (voies de [mathématiques](#) et de [sciences et technologie](#)) (BES).

Contenu:**1. Rappels**

1. Méthode scientifique: observations expérimentales - théories et modèles
2. Grandeurs mesurables - Dimensions et unités
3. Rappels de mécanique classique
4. Rappels d'électrostatique
5. Rappels d'électromagnétisme
6. Ondes périodiques
7. Ondes électromagnétiques
8. Premiers modèles de l'atome

2. Atome d'hydrogène: modèle classique

1. Effet photo-électrique
2. Spectre de raies - Rayonnement du corps noir
3. Modèle de Bohr

3. Atome d'hydrogène: modèle quantique

1. Propriétés quantiques de l'électron
2. Mécanique quantique - Équation de Schrödinger

4. Atomes polyélectroniques

1. Organisation électroniques des atomes
2. Périodicité des propriétés des éléments

5. Liaison chimique

1. Modèle de Lewis - Modèle VSEPR
2. Modèle ondulatoire
 - Combinaison linéaire des orbitales atomiques (LCAO)
 - Molécules diatomiques homo nucléaires - Ordre de liaison, énergie et longueur de liaison
 - Molécules diatomiques hétéronucléaires - le cas de HF
 - Molécules complexes - Hybridation
 - Polarité de liaison - Caractère ionique - Moment dipolaire

6. Propriétés électriques des molécules

1. Condensateur plan - Constante diélectrique
2. Effet d'un champ électrique sur une molécule isolée - Dipôle permanent - Dipôle induit
3. Effet d'un champ électrique sur un gaz, un liquide ou une solution - Équation de Debye
4. Effet du champ électrique d'une onde électromagnétique - Indice de réfraction
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 recommandé. 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, les volumes

- *Structure électroniques des molécules* (1. De l'atome aux molécules simples et 2. Géométrie, réactivité et méthode de Hückel, éditeur: Dunod; année de publication: 2003; ISBN: 2 10 007920 4 et 2 10 007921 2 respectivement)

sont recommandés. Ces volumes sont disponibles à la librairie *Zone*, local 0128 du pavillon Adrien-Pouliot.

De plus, le contenu du cours est disponible sur le site web, à l'adresse suivante :

http://www.chm.ulaval.ca/ttdang/chm10098_a04/

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

- P. W. Atkins, *Chimie physique* (traduction de la 6e éd. anglaise), 2000 (**QD 453.2 A874 2000 F**)
- P. W. Atkins, Julio De Paula, *Physical Chemistry*, 7th ed., W. H. Freeman, 2002 (**QD 453.2 A874 2002**)
- R. Chang, *Physical Chemistry for the Chemical and biological Sciences*, 3ième édition, 2000 (**QD 453.2 C456 2000**)
- Yves Jean, François Volatron, *Structure électronique des molécules 1. De l'atome aux molécules simples*, 3ième édition, Dunod, 2003 (**QD 461 J43 2003 1**)

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		5
devoirs	à quelques reprises durant la session		20
premier examen	1 Octobre 2004	110 minutes	25
second examen	5 Novembre 2004	110 minutes	25
troisième examen	10 Décembre 2004	110 minutes	25

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. 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	