

CHIMIE PHYSIQUE 2	UE n°39
-------------------	------------

CATEGORIE : TECHNIQUE LONG	SECTION : SCIENCES DE L'INGÉNIEUR INDUSTRIEL
	OPTION : CHIMIE
Année : Bloc 4	
Acronyme : sera complété par le secrétariat	
Langue(s) d'enseignement : Français.	
Coordonnées du service : HELdB - Service de Chimie physique & Catalyse Tél : +32 2 526 73 16 ; mail : scasciato@heldb.be	
Enseignant responsable : Stefano CASCIATO – scasciato@heldb.be	
Autre(s) enseignant(s) de l'UE : Néant.	
Nombre d'heures : 45 h	Nombre de crédits : 4 ECTS
Niveau du cycle : 2	Période : Q2
Cadre européen de certification : Niveau 7	
Caractère obligatoire ou au choix dans le programme ou option de l'étudiant : Cours obligatoire dans le programme.	

Contribution de l'UE au profil d'enseignement du programme :

Au terme de sa formation, le bachelier en Sciences de l'ingénieur industriel :

- rédige des rapports, fiches techniques, protocoles ou manuels d'utilisation en les rendant accessibles et adaptés au public cible ;
- seul ou en groupe, organise son temps, planifie son travail et respecte les délais en tenant compte des priorités et des moyens ;
- Identifie, traite et synthétise les données pertinentes pour ses projets scientifiques.

Liste des UE prérequis et corequis :

Pré requis : Néant.

Corequis : Néant.

Autres connaissances ou compétences prérequis :

Néant.

Description des objectifs et des contenus de l'UE :

AA1 : Chimie physique 2

Objectifs : Cet enseignement vise à permettre aux étudiants qui se destinent tant à l'industrie chimique qu'à l'industrie biochimique de compléter leur compréhension des propriétés moléculaires de la matière. Il intègre les aspects macroscopique et microscopique de la thermodynamique, développe le cadre interprétatif de la chimie quantique et l'applique à la spectroscopie.

Contenu :

1. Distribution de Boltzmann
 - Introduction
 - Fonction de partition
 - Distribution de Boltzmann
 - Signification physique
2. Mouvements moléculaires et équipartition
 - Translation moléculaire
 - Rotation moléculaire
 - Vibration moléculaire
 - Degré de liberté et termes quadratiques
 - Chaleur molaire des gaz et équipartition
3. Introduction à la mécanique quantique
 - Origines de la théorie quantique
 - Les postulats de la mécanique quantique
4. Niveaux énergétiques
 - Quantification de la translation
 - Première conséquence en spectroscopie
 - Application à l'étude de molécules organiques conjuguées
 - Quantification de la vibration
 - Quantification de la rotation
5. Spectroscopie
 - Spectres de rotation – vibration
 - Rotation pure
 - Rotation - vibration
 - Spectres électroniques
 - Fluorescence et phosphorescence
 - Diagramme de Jablonski

AA2 : Exercices de chimie physique

Objectifs : Les exercices portent sur la partie quantique et spectroscopique du cours théorique. L'analyse et le traitement de spectres IR et UV de molécules diatomiques permettra l'évaluation de constantes physicochimiques et thermodynamiques.

Contenu :

- Exercice n°1 : Analyse d'un spectre infrarouge
- Interprétation du spectre IR de HBr ou HCl
 - Méthode d'évaluation des constantes thermodynamiques
 - Résolution et rapport
- Exercice n°2 : Analyse d'un spectre électronique
- Interprétation du spectre UV de I₂
 - Méthode de Birge-Sponer
 - Résolution et rapport

Activités et méthodes d'apprentissage et d'enseignement :

AA1 : Cours *ex cathedra*. Chaque chapitre est abordé au cours par un exposé verbo-iconique (présentation PowerPoint). Les slides sont à la disposition des étudiants mais volontairement incomplets pour favoriser l'interaction et susciter des moments d'apprentissage réflexifs. Ces séquences d'apprentissages sont illustrées par de nombreux exemples et exercices.

AA2 : Une introduction théorique est présentée aux étudiants afin de revenir sur les outils nécessaires à la réalisation des exercices. Ensuite, ceux-ci sont proposés aux étudiants et sont soumis à leur sagacité avant de faire l'objet de la rédaction d'un rapport. Les étudiants seuls ou en groupes réalisent l'analyse et le traitement de spectres électromagnétiques, typiquement dans la région de l'infrarouge et de l'ultraviolet.

Mode d'évaluation et de pondération par activité au sein de l'UE :

Cours concernés	H	Pond.	Janvier			Juin *			Deuxième session		
			Eval Continue	Ecrit	Oral	Eval Continue	Ecrit	Oral	NR	Ecrit	Oral
AA1	30	80%					100%			100%	
AA2	15	20%				100%			100%		

NR = Note reportée

Informations sur le mode d'évaluation :

AA1 : Examen écrit basé sur la restitution de concepts théoriques et sur la résolution d'exercices.

AA2 : Évaluation continue non remédiable. La note finale fait l'objet d'une moyenne arithmétique des notes correspondantes à chacun des exercices.

La note de l'UE est la moyenne pondérée des 2 AA.

Informations complémentaires :

Si l'une des notes des AA est strictement inférieure à 8/20, cette note est la note finale de l'UE.

Acquis d'apprentissages sanctionnés, spécifiques et contribuant à l'UE :

À l'issue du cours de chimie physique 2, l'étudiant est capable de :

- établir le lien entre le nombre moyen de molécules sur un niveau d'énergie donné et la valeur énergétique de ce niveau ainsi que l'effet de la température sur la répartition énergétique, pour un système donné à l'équilibre ;
- évaluer les mouvements moléculaires par la mécanique classique et d'évaluer la chaleur molaire sur la base de ces approximations ;
- expliquer les écarts observés par le théorème d'équipartition de l'énergie (chaleurs molaires à basse température) par la mécanique quantique ;
- énumérer et développer les postulats de la mécanique quantique ;
- évaluer les mouvements moléculaires par la mécanique quantique et d'en expliquer les différences avec le modèle établi par la mécanique classique
- démontrer les règles permises qui régissent les transitions énergétiques ;
- étudier le changement d'état électronique par absorption ou émission d'un photon et d'évaluer des grandeurs physicochimiques sur la base de l'analyse d'un spectre ;
- discerner la fluorescence de la phosphorescence du point de vue mécanistique.

À l'issue des exercices de chimie physique, l'étudiant est capable de :

- exploiter des résultats expérimentaux dans un esprit critique ;
- établir des liens conceptuels entre des notions théoriques et certaines grandeurs accessibles expérimentalement ;
- vérifier expérimentalement la valeur et les limites de modèles de représentation mathématique ;
- produire des documents en toute rigueur scientifique.

Description des sources, des références et des supports (indiquer ceux obligatoires et ceux suggérés) :

AA1 :

Obligatoires :

Les notes de cours (présentation PowerPoint) sont disponibles sur le campus numérique.

Suggérés :

- Chimie physique

Peter William Atkins, Julio De Paula

traduit par Monique Mottet, Jean Toullec

Collaborateur Gérard Férey

De Boeck Université 2004

ISBN 2804145395