

UNIVERSITE DE MONTREAL  
DÉPARTEMENT DE CHIMIE

**Plan de cours**

COURS : CHM 2995

3 CRÉDITS

TRIMESTRE : Automne 2007

TITRE DU COURS : Physicochimie générale 2

PRÉALABLES : CHM 1994  
CHM 1995

*Description de l'annuaire*

Théorie du lien chimique. Etude expérimentale de la structure moléculaire : spectroscopies d'absorption électronique, vibrationnelle (IR et Raman) et rotationnelle, RMN, RPE.

*Objectifs du cours*

Ce troisième cours de chimie physique vise à familiariser l'étudiant aux notions fondamentales de la mécanique quantique et de la spectroscopie. L'étudiant possèdera à la fin du cours les outils nécessaires pour comprendre et analyser les résultats des techniques spectroscopiques couramment employées en biochimie.

- A la fin du cours, l'étudiant :
- Connaîtra les principes de base contrôlant les interactions entre la lumière et la matière
- Connaîtra les principes fondamentaux de la chimie quantique et de la structure atomique
- Pourra décrire des systèmes simples par des concepts quantiques
- Pourra appliquer les concepts de la chimie quantique à la description des orbitales atomiques et de la liaison chimique
- Pourra décrire la structure des molécules polyatomiques à partir des principes quantiques
- Connaîtra les principes qui contrôlent les interactions faibles et leur rôle dans l'auto-assemblage des molécules
- Connaîtra les principes de base de la spectroscopie d'absorption électronique, de la spectroscopie de fluorescence, des spectroscopies vibrationnelles Raman et Infra-rouge, et de la spectroscopie RMN et de leur utilisation dans les sciences de la vie
- Utilisera ces concepts fondamentaux pour analyser des systèmes d'intérêt biochimique.

*Syllabus du cours*

1. LUMIÈRE ET SPECTROSCOPIE
  - La nature ondulatoire de la lumière
  - La nature corpusculaire de la lumière
  - L'hypothèse de de Broglie
2. NOTIONS FONDAMENTALES DE CHIMIE QUANTIQUE
  - Introduction
  - Le principe d'incertitude de Heisenberg
  - L'équation de Schrödinger
  - Les fonctions d'onde
  - Solutions de l'équation de Schrödinger pour des systèmes simples

3. L'ATOME D'HYDROGÈNE ET LES ORBITALES ATOMIQUES
  - Solution de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène
  - Les nombres quantiques
  - Les différents types d'orbitales atomiques
  - Les atomes polyélectroniques
4. LES ORBITALES MOLÉCULAIRES
  - Les molécules diatomiques
  - Les molécules polyatomiques non conjuguées
  - Les molécules polyatomiques conjuguées
5. PRINCIPES DE L'AUTOASSEMBLAGE
  - Mesures de la taille et forme des grandes molécules
  - Liaisons « faibles »
  - Les différents niveaux d'auto-assemblage
6. LES TRANSITIONS SPECTRALES
  - La nature des transitions
  - La position des raies spectrales
  - L'intensité des raies spectrales
7. LA SPECTROSCOPIE VIBRATIONNELLE
  - La spectroscopie infra-rouge : théorie et applications
  - La spectroscopie Raman : théorie et applications
8. LA SPECTROSCOPIE ÉLECTRONIQUE
  - La spectroscopie d'absorption : théorie et applications
  - La spectroscopie de fluorescence : théorie, techniques et applications
9. LA RÉSONANCE MAGNÉTIQUE NUCLÉAIRE
  - Principe et définitions
  - Les spectres à une dimension
  - Les spectres à deux dimensions
  - L'imagerie par RMN

**(1) HORAIRE DES COURS (Session Automne 2007)**

Jeudi	TH	9H30 à 11H30	G-715
Vendredi	TH	12H30 à 13H30	G-715
Lundi	RPN	11H30 À 12H30	G-715

SEMAINE	DATE(S)	SUJETS
1	Sept 6,7	Lumière et spectroscopie (F. M. Winnik)
2	Sept 13, 14	Notions fondamentales de chimie quantique (F. M. Winnik)
3	Sept 20, 21	les orbitales atomiques et moléculaires (F. M. Winnik)
4	Sept 27, 28	Les orbitales moléculaires et les autres liaisons (F. M. Winnik)
5	Oct 4, 5	Les macromolécules et l'auto-assemblage (F. M. Winnik)
6	Oct 11,12	Les interactions moléculaires (F. M. Winnik)
7	Oct 18, 19	<b>OCT 18: Examen Intra</b> Les interactions moléculaires (F. M. Winnik)
8	Relâche	
9	Nov 1, 2	Les transitions spectrales (F. Winnik)
10	Nov 8, 9	Spectroscopie vibrationnelle (Y. Boulanger)
11	Nov 15,16	Spectroscopie électronique : UV-Visible (F. Winnik)
12	Nov 22,23	Spectroscopie électronique: fluorescence (F. Winnik)
13	Nov 29,30	Résonance magnétique nucléaire (Y. Boulanger)
14	Déc 6, 7	Résonance magnétique nucléaire (Y. Boulanger)

**(7) LIVRES RECOMMANDÉS**

**Physical Chemistry for the Life Sciences, P. Atkins, J. de Paula, 2006, Chap. 9, 10, 11, 13**

Chimie Physique, P. Atkins, 6eme ed

Principles of Physical Biochemistry, K. E. van Holde, W. C. Johnston, P. S. Ho

Prentice Hall Chapitres 8, 9, 10, 11, 12 ,7

Physical Chemistry, Principles and Applications in Biological Sciences, Tinoco, Sauer, Wang, and Puglisi, Prentice Hall, Chapitres 9, 10

**(8) PROFESSEUR RESPONSABLE DU COURS**

Françoise M. Winnik

Faculté de Pharmacie et Département de Chimie

Pavillon J. Armand Bombardier: Bureau 4075

Tel : (514) 340-5179

Courriel : francoise.winnik@umontreal.ca

**Conférencier invité :**

Yvan Boulanger

Tel : (514) 890-8350 poste 33148

Courriel : [yvan.boulanger@umontreal.ca](mailto:yvan.boulanger@umontreal.ca)

**(9) REPETITEUR**

Rodolphe Obeid

Département de Chimie

Pavillon J. Armand Bombardier: Bureau 4077

Tel : (514) 340-5177 poste 7446

Courriel : rodolphe.el.hajj.obeid@umontreal.ca

**(10) ÉVALUATION**

MOYEN D'ÉVALUATION	PONDÉRATION	DATE	DURÉE DE L'EXAMEN
Examen intra	40 %	18 oct. 2007	2 Hre(s)
Examen final	60 %	20 déc. 2007	3 Hre(s)

**(11) RAPPELS**

A) La date limite pour modifier votre choix de cours, qui coïncide avec la date limite pour abandonner un cours sans frais, est le **18 septembre 2008**

B) la date limite pour abandonner un cours est le **9 novembre 2008**

C) Il est obligatoire de motiver une absence prévisible à une évaluation dès qu'un(e) étudiant(e) est en mesure de constater qu'il (elle) ne pourra être présent (e). Il appartiendra à l'autorité compétente de déterminer si le motif est acceptable.