

UE Chimie théorique et spectroscopie

 ECTS
3 crédits

 Composante
UFR de Chimie
et de biologie

 Période de
l'année
Printemps (janv.
à avril/mai)

Diplômes intégrant cet élément

- Licence Chimie

- Langue(s) d'enseignement: Français
- Ouvert aux étudiants en échange: Oui
- Code d'export Apogée: YACH6C22

Présentation

Description

Cours Magistraux :

Partie chimie théorique :

- Introduction / rappels liaisons chimiques
- Interactions entre deux systèmes. Termes d'échange et de Coulomb. Approximation des Orbitales Frontières. Dureté et mollesse des réactifs
- Effets électroniques de substituants. Effets des substituants sur le système π de l'éthylène.
- Etude de la réactivité chimique. Description d'une réaction chimique. Description du profil énergétique par l'approximation des OF. Contrôle thermodynamique, contrôle cinétique. Réactions de cycloaddition. Réactions ioniques.

Partie Spectroscopies:

- Théorie des groupes pour la spectroscopie. Groupe de symétrie d'une molécule. Représentation d'un groupe. Formule de réduction.
- Introduction à la spectroscopie. Domaine électromagnétique. Niveaux d'énergie moléculaires. Interactions d'une molécule et d'une onde. Etude théorique. Etude expérimentale.

- Spectroscopie Vibrationnelle. Modèle de vibration d'une molécule diatomique. Anharmonicité. Spectre de vibration-rotation. Molécules polyatomiques
- Spectroscopie Electronique. Spectroscopie atomique. Transitions électroniques moléculaires.

Travaux Dirigés :

Exercice d'application et analyse de résultats expérimentaux

Objectifs

Objectifs pédagogiques de l'UE :

Prédire la réactivité moléculaire avec la théorie des orbitales moléculaires.

Connaître des notions sur les mouvements des vibrations moléculaires et sur les mouvements électroniques moléculaires ainsi que sur leurs spectroscopies.

Heures d'enseignement

CM	CM	25,5h
----	----	-------

Pré-requis recommandés

Les préalables pour suivre cet enseignement sont les UE suivantes, ou un programme équivalent :

Cours de Structure de la Matière et de Liaison Chimique

Période : Semestre 6

Compétences visées

Prédire la structure et la réactivité moléculaires.

Connaître des notions sur les mouvements de vibration moléculaires et les mouvements électroniques moléculaires ainsi que sur leurs spectroscopies.

Bibliographie

Manuel de chimie théorique; P. Chaquin; Ellipses.

Introduction à la chimie quantique ; P.Hiberty & N.T.Anh ; Ellipses.

Spectroscopie ; J.M. Hollas ; Dunod

Logiciel OrbiMol

Infos pratiques

Contacts

Responsable pédagogique

PEREZ DEL VALLE Carlos

✉ carlos.perez@univ-grenoble-alpes.fr

Lieu(x) ville

➤ Grenoble

Campus

➤ Grenoble - Domaine universitaire