


# UE Chimie théorique et spectroscopie

 ECTS  
3 crédits

 Composante  
UFR Chimie-  
Biologie

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

- > 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  $\pi$  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

UE Chimie théorique et spectroscopique - 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](mailto:carlos.perez@univ-grenoble-alpes.fr)

---

## Lieu(x) ville

› Grenoble

---

## Campus

› Grenoble - Domaine universitaire