

# Structures et symétries moléculaires

## Titulaires

Emilie CAUET (Coordonnateur), Antoine Aerts et Sophie Bauduin

## Mnémonique du cours

CHIM-F304

## Crédits ECTS

5 crédits

## Langue(s) d'enseignement

Français

## Période du cours

Premier quadrimestre

## Campus

Solbosch

## Contenu du cours

Structure électronique des atomes (moments cinétiques d'orbite et de spin, configurations et états électroniques, couplage spin-orbite). Structure moléculaire (approximation de Born-Oppenheimer, surfaces d'énergie potentielle et réactivité). Les molécules et la théorie des groupes de symétrie. Théorie LCAO des orbitales moléculaires (molécules diatomiques et polyatomiques, théorie de Hückel pour les systèmes conjugués, molécules organiques et polymères). Degrés de liberté nucléaires (séparation des mouvements et niveaux d'énergie). Rotation moléculaire (rotateur rigide et non rigidité). Vibration moléculaire (modèle harmonique et modes normaux, anharmonicité).

## Objectifs (et/ou acquis d'apprentissages spécifiques)

Construire la structure quantique des systèmes électroniques depuis les atomes les plus simples jusqu'aux molécules complexes. Lier les notions de structure aux autres orientations du cursus de Chimie (chimie organique, inorganique, biologique, des polymères et du solide). Fournir les bases nécessaires aux cours de master (spectroscopie, cinétique chimique, réactivité quantique, chimie computationnelle, applications de la théorie des groupes...).

## Pré-requis et co-requis

### Cours co-requis

CHIM-F206 | Mécaniques classique et quantique | 10 crédits et  
MATH-F214 | Compléments de mathématiques | 5 crédits

## Méthodes d'enseignement et activités d'apprentissages

Cours ex-cathedra avec support de diapositives

Portail sur l'UV avec copie des diapositives et informations diverses.

Exercices qui se déroulent en parallèle au cours théorique et l'illustrent par des exemples concrets.

## Contribution au profil d'enseignement

Décrire les aspects microscopiques de la structure atomique et moléculaire, qui conditionnent les propriétés et la réactivité macroscopique.

## Références, bibliographie et lectures recommandées

Mc Quarrie et Simon "Physical Chemistry, a molecular approach" University Science Books (1997).

Atkins et de Paula "Physical Chemistry" Oxford University Press (2006).

Gill "Orbitals in Chemistry" Cambridge (2000).

## Support(s) de cours

Université virtuelle

## Autres renseignements

## Lieu(x) d'enseignement

Solbosch

## Contact(s)

Service Spectroscopy, Quantum Chemistry and Atmospheric Remote Sensing (SQUARES), C.P. 160/09, bâtiment D, niveau 7, campus du Solbosch

Sophie Bauduin

sophie.bauduin@ulb.be

Antoine Aerts

antoine.aerts@ulb.be

La communication entre les titulaires du cours et l'étudiant passe principalement par le courrier électronique (uniquement les adresses "ulb.be").

## Méthode(s) d'évaluation

Examen écrit et Examen oral

## Méthode(s) d'évaluation (complément)

Première session (janvier) : l'examen est un examen écrit SANS notes de cours/support.

Deuxième session (août) : l'examen est un examen oral SANS notes de cours/support.

Langue(s) d'évaluation principale(s)

Français

## Programmes

Programmes proposant ce cours à la faculté des Sciences

BA-CHIM | Bachelier en sciences chimiques | bloc 3

