

Chimie physique moléculaire : structure, spectroscopie et dynamique

Titulaires

Nathalie VAECK (Coordonnateur) et Emilie CAUET

Mnémonique du cours

CHIM-F401

Crédits ECTS

5 crédits

Langue(s) d'enseignement

Français

Période du cours

Deuxième quadrimestre

Campus

Solbosch

Contenu du cours

Le cours aborde différents aspects de la chimie physique moléculaire:

- > étude du paysage des hypersurfaces d'énergie potentielles liées aux réactions chimiques;
- > étude de la dynamique des noyaux sur les hypersurfaces d'énergie potentielle;
- > introduction à la théorie des collisions;
- > contrôle quantique des réactions chimiques;
- > vibration-rotation de molécules polyatomiques et structure des spectres correspondants.

Objectifs (et/ou acquis d'apprentissages spécifiques)

Ce cours a pour objectif d'introduire à la modélisation dynamique des processus chimique au niveau microscopique, ainsi qu'à la modélisation de la vibration-rotation de molécules polyatomiques.

Méthodes d'enseignement et activités d'apprentissages

Enseignement présentiel; cours ex-cathédra (12h) et travaux pratiques (24h).

Contribution au profil d'enseignement

Introduction conceptuelle aux réactions chimiques au niveau microscopique et à la vibration-rotation de molécules polyatomiques.

Références, bibliographie et lectures recommandées

(1) "Spectra of atoms and molecules", P.F. Bernath, Oxford University Press, New York, 2nd edition (2005), ISBN 0-19-517759-2, BST 543.085.8 B 457 s (1st ed.);

(2) "Fundamentals of molecular symmetry", P.R. Bunker and P. Jensen, IOP Publishing Limited (2005), ISBN 0 7503 0941 5, BST 541.22 B 884 f.

Autres renseignements

Lieu(x) d'enseignement

Solbosch

Contact(s)

Nathalie VAECK (nathalie.vaeck@ulb.be), Jean VANDER AUWERA (jean.vander.auwera@ulb.be) ou Antoine AERTS (antoine.aerts@ulb.be), Service Spectroscopy, Quantum Chemistry and Atmospheric Remote Sensing (SQUARES), C.P. 160/09, bâtiment D, niveau 7, campus du Solbosch. La communication entre les titulaires du cours et l'étudiant passe principalement par le courrier électronique (uniquement les adresses "ulb.be").

Programmes

Programmes proposant ce cours à la faculté des Sciences

MA-CHIM | Master en sciences chimiques | finalité Approfondie/bloc 1, finalité Didactique/bloc 1 et finalité Spécialisée/bloc 1