



SC

**CHIM1241** Eléments de cristallographie et spectroscopie moléculaire - 1ère partie: cristallographie; 2ème partie: Spectroscopie moléculaire

[60h+30h exercices] 8 crédits

Cette activité se déroule pendant toute l'année

**Enseignant(s):** Jean-Paul Declercq, Jean-Louis Habib Jiwan  
**Langue d'enseignement :** français  
**Niveau :** cours de 1er cycle

**Objectifs (en terme de compétences)**

1ère partie - Cristallographie:

- Compréhension raisonnée de la symétrie et en particulier de la symétrie moléculaire.
- Compréhension des fondements des méthodes modernes d'analyse cristallographique et des résultats qu'elles permettent d'obtenir.

2e partie - spectroscopie moléculaire :

- acquisition des bases générales de spectroscopie moléculaire
- maîtrise des bases des spectroscopies les plus courantes.

**Objet de l'activité (principaux thèmes à aborder)**

1ère partie - Cristallographie:

Etude systématique de la symétrie des objets finis et infinis. Symétrie moléculaire et représentation. Notion de groupe ponctuel et spatial. Application à l'état cristallin ; notions de système et de réseau. Introduction à la diffraction des rayons X par les cristaux et à la détermination de structures cristallines et moléculaires.

2e partie - spectroscopie moléculaire :

Initiation des étudiants aux bases générales de spectroscopie et présentation des spectroscopies les plus courantes telles que infra-rouge, RMN, absorption électronique, Raman, etc. Le cours comprendra également une introduction à la spectrométrie de masse.

**Résumé : Contenu et Méthodes**

Contenu: 1ère partie - Cristallographie:

L'état cristallin. La symétrie des objets finis ; notations de Schoenflies et de Hermann-Mauguin; les groupes ponctuels et la symétrie moléculaire. Notions de représentation ; le caractère d'une représentation ; représentation irréductible et table de caractère. La symétrie des motifs périodiques infinis; les réseaux, les systèmes et les groupes spatiaux. Introduction à la diffraction des rayons X par les cristaux et à la détermination de structure. Les structures cristallines. Eléments de morphologie cristalline.

Contenu: 2e partie - spectroscopie moléculaire :

1. Représentation moléculaire. Interaction onde - matière et spectroscopie.
2. Spectroscopies courantes : principes généraux ; spectroscopies infra-rouge et RMN ; spectrométrie de masse ; spectroscopies micro-ondes, UV-Visible, photoélectronique et Raman.
3. Notions complémentaires : transitions moléculaires et intensité ; spectroscopies à transformée de Fourier.

Méthode : Cours magistraux comprenant un maximum d'interaction avec l'auditoire. Séances d'exercices encadrées.

### **Autres informations (Pré-requis, Evaluation, Support, ...)**

Pré-requis : 1ère partie - cristallographie: Notions de chimie générale et de physique générale.

2e partie - spectroscopie moléculaire : Physique de base (PHYS1100 et PHYS1170), chimie générale de base (CHIM1151).

Evaluation : Examens écrits comprenant des questions de théorie et des exercices, suivis d'un oral.

Support : Deux syllabus (1ère partie - cristallographie, 2e partie - spectroscopie moléculaire)

1ère partie - cristallographie: 6 séances d'exercice de 1h40.

2e partie - spectroscopie moléculaire : 5 séances d'exercices de 4H00