

Code UE S3CH521

Intitulé UE Chimie théorique et physique 1, Spectroscopies 2

Responsable UE Emmanuelle GIRARD-VALENCIENNES (emmanuelle.girard-valenciennes@univ-reunion.fr)

Semestre S5

ECTS 6

Langue d'enseignement Anglais et Français

Accessible aux étudiants en échange international Oui

Volume horaire (h)

CM	TD	TP	Total
34	26	0	60

Descriptif

S2CH521a Chimie Théorique/Physique 1 (30 h)

1- Atomes polyélectroniques • Principe de Pauli et indiscernabilité des électrons • Moments cinétiques de l'atome, modèle de couplage de Russel-Saunders. Termes et niveaux spectroscopiques. Règles de Hund. • Loi de Boltzmann • Spectroscopie photoélectronique (XPS, UPS) • Spectroscopie d'émission/absorption des atomes • Effet Zeeman

2- Molécules diatomiques • Approximation de Born-Oppenheimer • Théorie des OM : application de la méthode des variations (énergies, expression des OM). • Koopmans • Termes et niveaux • Structure vibrationnelle ; Frank-Condon. 3- Orbitales moléculaires de systèmes polyatomiques conjugués • Approximations de Hückel • Méthode de Hückel avec hétéroéléments • Théorie des orbitales frontières. 4- Symétrie et petites molécules • Représentations irréductibles • OA de symétrie

S2CH521b Spectroscopies 2 (30 h)

1) Rappels et approfondissement en Spectroscopie = 20 h

A- RMN • RMN impulsionnelle • Aimantation, Equations de Bloch • Expériences et paramètres • RMN multidimensionnelle, ^1H , ^{13}C , d'autres noyaux

B- IR et Raman : Théorie, instrumentation, interprétation de spectres de molécules simples

C- RPE •-Introduction • Effets d'un champ magnétique sur un état de spin non nul • Systèmes anisotropes • Couplage hyperfin • Systèmes de spin électronique supérieur à $1/2$ (structure fine) • Systèmes couplés • Interaction Zeeman électronique

D- ENDOR • Introduction • : $S = 1/2$ et $I = 1/2$ ou $3/2$ E- Mössbauer • Introduction et applications

2) Techniques combinées pour l'élucidation structurale de molécules complexes = 10 h TD

Prérequis

L1S1 : UE méthodologie (S1CH120), Architecture de la matière 1 (S1CH121) et 2 (S1CH122).

L2S3 : Atomistique et Liaisons Chimiques / Spectroscopies 1 (S2CH321)