

**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, 13C, 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)