

Code UE S3CH628

Intitulé UE Chimie théorique et physique 2

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

Semestre S6

ECTS 3

Langue d'enseignement Français

Accessible aux étudiants en échange international Oui

Volume horaire (h)

CM	TD	TP	Total
14	16	0	30

Descriptif

1- Mécanique quantique pour les chimistes

- Dynamique des systèmes microscopiques : équation de Schrödinger, Interprétation de Born de la fonction d'onde
- Principes de la mécanique quantique : Informations contenues dans la fonction d'onde, relation d'indétermination de Heisenberg, postulats de la mécanique quantique
- Applications : mouvement de translation (particule dans une boîte, effet tunnel), mouvement de vibration (niveaux d'énergie, fonction d'onde, molécules diatomiques), mouvement de rotation.

2- Spectroscopies moléculaires de rotation et de vibration

- Spectres de rotation pure – Moments d'inertie – Niveaux d'énergie rotationnelle – Transitions rotationnelles – Spectres Raman de rotation
- Vibration des molécules diatomiques – Vibrations moléculaires – Règles de sélection – Anharmonicité – Spectres de vibration-rotation – Spectres Raman de vibration
- Vibration des molécules polyatomiques – Modes normaux – Spectres d'absorption infrarouge – Spectres Raman de vibration – Symétrie des vibrations moléculaires

3- Spectroscopies moléculaires de transition électronique

- Caractéristiques des transitions électroniques des molécules diatomiques, polyatomiques.
- Évolution des états électroniques excités : fluorescence, phosphorescence.

Prérequis

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

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

L2S4 : TP L2 (S2CH421)

L3S5 : chimie théorique/physique 1 et Spectroscopies 2 (S3CH521)