

4.0 crédits	22.5 h	2q
-------------	--------	----

Enseignants:	Nauts André ;
Langue d'enseignement:	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Thèmes abordés :	<p>> Structure et dynamique des molécules</p> <ul style="list-style-type: none"> - Hamiltoniens moléculaires polyatomiques, surfaces d'énergie potentielle, représentations adiabatiques et diabatiques, intersections coniques. - Classification des états électroniques et vibrationnels par la théorie des groupes <p>> Introduction à la chimie quantique</p> <ul style="list-style-type: none"> - Equations de Hartree-Fock moléculaires - Méthode LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals), équations de Roothaan-Nesbet-Pople <p>! Interactions de configuration.</p> <p>> Applications</p> <ul style="list-style-type: none"> - Méthodes dépendantes du temps appliquées à la dynamique moléculaire : photodissociation et calculs de spectres de photoabsorption moléculaire, contrôle par laser - Spectroscopie résolue en temps - Implémentation d'une somme par un schéma STIRAP moléculaire - Molécules biologiques et intersections coniques - Initiation active à certains logiciels de dynamique moléculaire et de chimie quantique
Acquis d'apprentissage	<p>Le cours vise à présenter quelques aspects fondamentaux de la physique des systèmes moléculaires polyatomiques : structure et propriétés, dynamique et évolution.</p> <p>En outre, suivant l'intérêt de l'auditoire, quelques exemples d'ouverture de la physique moléculaire à d'autres domaines tels, par exemple, la dynamique moléculaire, la spectroscopie, la biophysique, la photochimie, seront abordés.</p> <p><i>La contribution de cette UE au développement et à la maîtrise des compétences et acquis du (des) programme(s) est accessible à la fin de cette fiche, dans la partie « Programmes/formations proposant cette unité d'enseignement (UE) ».</i></p>
Autres infos :	<p>Pré-requis : Atomes et molécules : PHYS 1341</p> <p>Support : syllabus + logiciels didactiques.</p>
Cycle et année d'étude :	> Master [120] en sciences physiques
Faculté ou entité en charge:	PHYS