UCL Université catholique de Louvain

LPHY1341

2015-2016

Atomes et molécules

5.0 crédits	30.0 h + 22.5 h	2q

Enseignants:	Lauzin Clément ; Urbain Xavier ;
Langue d'enseignement:	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Préalables :	LPHY1222, LPHY1322 *Le(s) prérequis de cette Unité d'enseignement (UE) sont précisés à la fin de cette fiche, en regard des programmes/formations qui proposent cette UE.*
Thèmes abordés :	Ce cours vise à donner une introduction à la physique atomique et moléculaire. En particulier, les thèmes suivants sont abordés. Pour la physique atomique : - La structure électronique des atomes et des ions - La notion d'orbitale atomique - Le couplage de moments angulaires - Les modes de désexcitation Pour la physique moléculaire : - L'approximation de Born-Oppenheimer - La notion d'orbitales moléculaires - Les Etats électroniques - La vibration et la rotation de petites molécules
Acquis d'apprentissage	a. Contribution de l'activité au référentiel AA (AA du programme) AA1 : 1.1, 1.4, 1.7 AA2 : 2.3, 2.4 AA3 : 3.2, 3.4 AA4 : 4.1 AA5 : 5.1 b. Formulation spécifique pour cette activité des AA du programme A la fin de cette activité, l'étudiant est capable de : 1. Etablir la structure électronique d'un atome, en particulier les termes et les configurations. 2. Décrire et appliquer les principes de base de la spectroscopie atomique, y compris les règles de sélection. 3. Décrire l'approche Hartree-Fock et l'interaction de configuration, et les appliquer au calcul numérique d'énergies de liaison et d'éléments de matrice dipolaires. 4. Manipuler correctement les bases de données atomiques pour en tirer les fréquences de transition, les temps de vie et rapports de branchement. 5. Décrire les notions fondamentales de la physique moléculaire, en particulier la description quantique des systèmes moléculaires à l'aide de hamiltoniens moléculaires et des équations de Schrödinger (dépendant et indépendantes du temps) correspondantes. 6. Interpréter les diverses représentations de ces équations et en discuter les solutions approchées, en particulier les représentations adiabatiques et diabatiques et la séparation de Born-Oppenheimer. 7. Interpréter certains modèles simples de dynamique moléculaire et d'analyse spectrale. 8. Décrire la structure électronique, les vibrations et les rotations des molécules diatomiques. 9. Décrire et appliquer les principes de base des spectroscopies de rotation, vibration et électronique des molécules diatomiques, y compris les bases des règles de sélection. *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) ».*
Modes d'évaluation des acquis des étudiants :	Examen écrit ou oral, questions fermées, développements courts ou longs. Résolution de problèmes avec résultat chiffré
Méthodes d'enseignement :	Exposés magistraux, séances d'exercices, travaux pratiques, manipulation de logiciels, consultation de bases de données.
Contenu :	I) Physique atomique - Méthode: la structure des atomes et ions est explicitée sur la base d'un bref rappel des résultats de la mécanique quantique et de la spectroscopie - Systèmes hydrogénoïdes, défaut quantique

	- Systèmes à plusieurs électrons: Méthode de Hartree-Fock - Champ central et corrections, schémas de couplage - Séries isoélectroniques - Transitions radiatives et règles de sélection II) Physique moléculaire - L'approximation de Born-Oppenheimer - Séparation des coordonnées - Etats électroniques - Orbitales moléculaires et orbitales atomiques - Etats vibrationnels et états rotationnels - Symétries des molécules diatomiques - Diagrammes de corrélation - Transitions radiatives et règles de sélection
Bibliographie :	B.H. Bransden & mp; C.J. Joachain, Physics of Atoms and Molecules
Faculté ou entité en charge:	PHYS

Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)

Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Mineure en physique	LPHYS100I	5	-	
Bachelier en sciences physiques	PHYS1BA	5	LPHY1222	