UCL Université catholique de Louvain

LPHY2144

2015-2016

Physique moléculaire

4.0 crédits	22.5 h	2q

Enseignants:	Nauts André ; Lauzin Clément ;
Langue d'enseignement:	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Thèmes abordés :	> Structure et dynamique des molécules - Hamiltoniens moléculaires polyatomiques, surfaces d -énergie potentielle, représentations adiabatiques et diabatiques, intersections coniques. - Classification des états électroniques et vibrationnels par la théorie des groupes > Introduction à la chimie quantique - Equations de Hartree-Fock moléculaires - Méthode LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals), équations de Roothaan-Nesbet-Pople ! Interactions de configuration. > Applications - 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	Le cours vise à présenter quelques aspects fondamentaux de la physique des systèmes moléculaires polyatomiques : structure et propriétés, dynamique et évolution. 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. *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) ».*
Autres infos :	Pré-requis : Atomes et molécules : PHYS 1341 Support : syllabus + logiciels didactiques.
Faculté ou entité en charge:	PHYS

Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)				
Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Master [120] en sciences physiques	PHYS2M	4	-	