

5.00 crédits

22.5 h + 7.5 h

Q2

Enseignants	Lauzin Clément ;
Langue d'enseignement	Anglais
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Thèmes abordés	L'unité d'enseignement couvre trois thèmes. La première partie présente la dérivation de l'hamiltonien moléculaire en vue d'une séparation optimale des variables. La seconde partie se concentre sur la théorie des groupes et sur l'utilisation de la symétrie pour simplifier les problèmes de physique moléculaires. Enfin, la troisième partie traite de différentes applications.
Acquis d'apprentissage	<p>A la fin de cette unité d'enseignement, l'étudiant est capable de :</p> <p>a. Contribution de l'unité d'enseignement aux acquis d'apprentissage du programme (PHYS2M et PHYS2M1) AA 1.1, AA1.2, AA1.3, AA 1.5, AA 1.6, AA 2.1, AA2.3, AA 3.1, AA 5.2</p> <p>b. Acquis d'apprentissage spécifiques à l'unité d'enseignement</p> <p>Au terme de cette unité d'enseignement, l'étudiant.e sera capable de :</p> <ol style="list-style-type: none"> déterminer la symétrie d'une molécule et utiliser cette information pour construire une fonction d'onde adaptée à cette référence ; utiliser le principe de Pauli pour rationaliser les intensités des spectres moléculaires ; résoudre un problème de Hückel ; comprendre les concepts de bases des calculs de dynamique moléculaire.
Modes d'évaluation des acquis des étudiants	Examen écrit ou oral ou rapport écrit
Méthodes d'enseignement	Cours et laboratoires ou démonstration de laboratoire
Contenu	<p>L'unité d'enseignement est structurée de la manière suivante :</p> <ol style="list-style-type: none"> Propriétés structurales et dynamiques des molécules : hamiltoniens moléculaires polyatomiques, séparation des mouvements électroniques et nucléaires, coordonnées moléculaires, représentations adiabatiques et diabatiques, intersections coniques. Théorie des groupes et structure moléculaire : introduction générale et classification des états moléculaires : électroniques, rotationnels, vibrationnels et de spin. Introduction à la chimie quantique : équations moléculaires de Hartree-Fock, méthode LCAO, équations de Roothaan-Nesbet-Pople, configurations électroniques. Présentation de différentes applications de la physique moléculaire en recherche fondamentale en physique moléculaire ainsi que dans d'autres domaines de la physique et de la chimie. <p>Selon l'intérêt de l'auditoire, d'autres sujets particuliers peuvent être abordés tels que, par exemple, la photo-absorption, la photo-dissociation, le contrôle par laser, la spectroscopie résolue en temps, la propagation des paquets d'ondes....</p> <p>Insistons sur le fait que, tout au long de l'unité d'enseignement, la symétrie des molécules sera utilisée pour résoudre des problèmes physiques, fournissant ainsi une application intéressante et concrète de la théorie des groupes.</p>
Bibliographie	P. Bunker, P. Jensen, Molecular Symmetry and Spectroscopy ,(2006) NRC Research Press. ISBN 978-0-660-19628-2. D.J. Tannor, Introduction to Quantum Mechanics- A Time-Dependent Perspective (2007) University Science Books . F.Gatti, B.Lasorne, H.-D.Meyer, A.Nauts, Applications of Quantum Dynamics in Chemistry, (2017) Springer.
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	5		
Master [60] en sciences physiques	PHYS2M1	5		