

LU3Ci001 : Mécanique quantique et spectroscopies

Responsables

P1 et P2

✉ Pr Alain Dubois

LCPMR

Tour 44/43, 1^{er} étage, bureau 118

☎ 01 44 27 66 31

✉ Dr Karine Le Guen

LCPMR

Tour 44/43, 1^{er} étage, bureau 115

☎ 01 44 27 66 08

1. Description

Volumes horaires : CM 24 h, TD 24 h, TD/TP 2 h, TP 10 h

Nombre de crédits : 6 ECTS

Barème /100 : contrôle continu /70 (contrôle continu intégral), TP /30 (dont examen de TP ; aucune restriction d'accès à l'examen de TP)

Parcours : monodisciplinaire / bidisciplinaires / sur-mineure chimie

Périodes d'enseignement : P1 et P2

Cours magistral proposé en anglais pour les étudiants volontaires en P1.

2. Présentation pédagogique

a. Objectifs

Faire le lien entre grandeurs physiques et outils mathématiques ;

Écrire l'opérateur Hamiltonien d'un système atomique ou moléculaire et l'équation de Schrödinger correspondante.

Appliquer un opérateur sur une fonction d'onde, écrire la condition de normalisation.

Vérifier qu'une fonction est fonction propre de l'opérateur Hamiltonien.

Aller au-delà de la configuration électronique : termes spectraux.

Associer une spectroscopie à un modèle théorique, c'est-à-dire connaître les principes des différentes spectroscopies étudiées et interpréter un spectre en termes de processus physiques.

Valider un modèle théorique par comparaison de ses prévisions aux données expérimentales.

b. Thèmes abordés

Fondement et formalisme de la mécanique quantique : fonctions d'onde et densité de probabilité, opérateurs et équation de Schrödinger.

Applications : puits de potentiel, quantification d'énergie et nombres quantiques, oscillateur harmonique, moment cinétique (rotateur rigide), spin et effet tunnel.

Structure des atomes (orbitales atomiques, modèle de Slater et introduction aux termes spectraux) et des molécules (orbitales moléculaires et symétries).

Spectroscopies atomiques et moléculaires (IR, UV-vis et X) ; moments de transition ; règles de sélection : émission, absorption, diffusion ; spectres électroniques, vibrationnels et rotationnels.

3. Prérequis

Chimie

Atomistique de l'UE LU1Ci001 ou LU1Ci011, spectroscopies de l'UE LU2Ci005, orbitales moléculaires et symétries moléculaires de l'UE LU2Ci001.

Physique classique

Énergies cinétique, potentielle et totale, force coulombienne, moment cinétique et ondes.

Mathématiques

Fonctions et dérivées usuelles, intégrales simples et multiples, intégration par parties, équations différentielles simples, matrices.