



# Spectroscopie Théorique



Niveau d'étude  
BAC +4



ECTS  
3 crédits



Composante  
Faculté des  
Sciences

## En bref

- › **Date de début des cours:** 1 sept. 2021
- › **Langue(s) d'enseignement:** Français
- › **Méthode d'enseignement:** En présence
- › **Organisation de l'enseignement:** Formation initiale
- › **Ouvert aux étudiants en échange:** Non

- rationaliser les spectres électroniques atomiques et moléculaires

- rationaliser les spectres rovibrationnels et RMN moléculaires

## Pré-requis nécessaires

Bases de mécanique quantique (systèmes simples : puits de potentiel infini, rotateur rigide, oscillateur harmonique ; méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger ; théorie des perturbations ; approximation orbitale) et bases de physique statistique.

## Présentation

### Description

Ce cours vise à approfondir et compléter les connaissances acquises d'un point de vue théorique en

spectroscopie par les étudiants lors de leur licence.

**Volumes horaires\* :**

CM : 15

TD : 9

### Objectifs

Compétences visées :

### Contrôle des connaissances

Contrôle terminal écrit

### Syllabus

1. Introduction aux spectroscopies – généralités
2. a) Interaction Matière-Rayonnement
3. b) Absorption/Emission(microscopique)
4. c) L'Équilibre Thermique
5. Spectroscopie Atomique
6. a) Rappels de Mécanique Quantique
7. b) Le Moment Cinétique
8. c) Addition de 2 Moments Cinétiques
9. d) Le Couplage Spin-Orbite
- 10e) Termes Spectroscopiques
- 11f) Règles de Hund
- 12g) Spectres Atomiques



13Vibration-Rotation des Molécules  
14a) Molécule Diatomique  
15b) Vibration des Polyatomiques  
16c) Rotation des Polyatomiques  
17Spectroscopie Moléculaire Électronique  
18a) Orbitales Moléculaires-Configurations Électroniques  
19b) Termes Électroniques  
20c) Transitions Vibroniques  
21d) Éléments de Photochimie  
22Spectroscopie RMN et RPE  
23a) Hamiltonien effectif de spins  
24b) Tenseur de blindage, contributions dia- et  
paramagnétiques  
25c) Couplage spin-spin  
Règles de sélection

---

## Informations complémentaires

### Contact(s) administratif(s) :

Secrétariat Master Chimie

<https://master-chimie.edu.umontpellier.fr/>

## Infos pratiques

---

### Contacts

#### Responsable pédagogique

Christophe RAYNAUD

✉ [christophe.raynaud1@umontpellier.fr](mailto:christophe.raynaud1@umontpellier.fr)

---

### Lieu(x)

› Montpellier - Triolet