

Partie 1 : Hamiltonien moléculaire et réponse linéaire dépendante du temps

- *Quel est le sens physique des différents termes contribuant à l'hamiltonien moléculaire ?*
- *Pourquoi a-t-on besoin de la version dépendante du temps de l'équation de Schrödinger pour comprendre une expérience de spectroscopie ?*
- *D'où vient la dépendance en temps de l'hamiltonien dans une expérience de spectroscopie ?*
- *Comment différencie-t-on, dans la théorie, une réponse linéaire d'une réponse non-linéaire ?*
- *Une transition peut-elle avoir lieu sans perturbation extérieure ?*
- *Suffit-il d'avoir un rayonnement avec la bonne fréquence de transition pour que cette transition ait effectivement lieu ?*
- *D'où viennent les règles de sélection ? Ces règles dépendent-elles de la perturbation extérieure appliquée à la molécule (champ électrique ou champ magnétique, par exemple) ?*