

## Partie 2 : Spectroscopie vibrationnelle et rotationnelle

Les sujets suivants sont traités dans cette seconde partie du cours :

- Motivation et introduction à l'approximation de Born-Oppenheimer (slides 1-6) pour, in fine, obtenir des équations de Schrödinger séparées (mais couplées) pour les électrons et les noyaux, permettant ainsi de traiter séparément la spectroscopie électronique (qui sera abordée dans la troisième et dernière partie du cours) et la spectroscopie nucléaire, qui est l'objet de ce cours.
- Description de la translation moléculaire, notion de centre de gravité (slides 7-11).
- Vibration d'une molécule diatomique : masse réduite, approximation harmonique, fréquence de vibration, énergie de point zéro, règles de sélection pour les transitions vibrationnelles (slides 12-20).
- Approximation harmonique pour n'importe quelle molécule : hessien moléculaire, fréquences propres de vibration, modes normaux (slides 21-23).
- Limites de l'approximation harmonique, potentiel de Morse (slides 24-26).
- Rotation d'une molécule diatomique : équation de Schrödinger pour une rotation (rigide) plane, niveaux d'énergie rotationnelle, règles de sélection pour les transitions rotationnelles, généralisation à des rotations non planes (slides 27-38).
- Transitions électroniques, vibrationnelles et rotationnelles : ordres de grandeur et comparaison (slide 39).
- La construction des hamiltoniens de translation, vibration et rotation (qui permettent de comprendre les spectroscopies associées) est détaillée dans des exercices corrigés (slides 9-11, 13-14, 16-17, 28-29, 31-33). La règle de sélection pour les transitions rotationnelles est également démontrée dans un exercice corrigé (slides 36-37).