

Partie 2 : Spectroscopie vibrationnelle et rotationnelle

- *Quel argument physique simple est utilisé pour justifier l'approximation de Born-Oppenheimer ?*
- *Quel est le sens physique de l'approximation adiabatique ? Est-elle justifiée au voisinage d'une géométrie où un changement d'état électronique est susceptible de se produire (à l'intersection énergétique entre deux états électroniques par exemple) ?*
- *L'équation de Schrödinger nucléaire est-elle strictement découplée de l'équation de Schrödinger électronique dans le cadre de l'approximation adiabatique ?*
- *Comment détermine-t-on, par la théorie, la structure d'équilibre d'une molécule ?*
- *Pourquoi peut-on qualifier la masse réduite de masse « effective » ?*
- *En quoi l'approximation dite « harmonique » est une approximation ? A-t-elle un lien avec le modèle d'oscillateur harmonique ? Peut-on utiliser cette approximation pour décrire la dissociation d'une molécule ?*
- *A-t-on besoin de résoudre l'équation de Schrödinger électronique pour déterminer une fréquence de vibration ?*
- *En quoi, du point de vue de la mécanique classique, le concept d'énergie de point zéro est surprenant. A-t-il un impact concret sur la détermination d'observables comme l'énergie de dissociation, par exemple ?*
- *Dans le cas d'une diatomique, la coordonnée de vibration est simplement la distance entre les deux atomes. Comment identifie-t-on les coordonnées de vibration dans le cas général d'une molécule comportant M atomes ?*
- *Le potentiel de Morse exploite une donnée supplémentaire par rapport à l'approximation harmonique. Laquelle ? Quel est l'intérêt d'un tel potentiel ?*
- *Peut-on exploiter le spectre rotationnel d'une diatomique pour déterminer sa géométrie d'équilibre ?*
- *En raisonnant sur des ordres de grandeur, on peut expliquer simplement pourquoi les spectroscopies électronique, vibrationnelle et rotationnelle sont, respectivement, des spectroscopies UV-visible, infrarouge et micro-onde. L'argument repose sur quelques constantes universelles. Lesquelles ?*