

## Objectifs

Connaître la structure et les propriétés des atomes et des molécules simples, soit isolés, soit en interaction avec un champ électromagnétique traité classiquement.

### **Compétences attendues à la fin de l'UE :**

Savoir écrire le hamiltonien d'un atome ou d'une molécule simple. Savoir analyser ses symétries et faire la liste des observables qui commutent avec lui. Connaître les approximations permettant de trouver les valeurs propres et les fonctions propres de ce hamiltonien. Savoir représenter les niveaux d'énergie des atomes et des molécules simples et écrire les fonctions d'onde qui leur sont associées ; savoir utiliser la méthode LCAO pour la description de molécules diatomiques. Connaître les notations spectroscopiques et leur signification. Savoir écrire une probabilité de transition en présence d'un champ électromagnétique dans une description semi-classique.

## Thèmes abordés / Notions et contenus

### Atomes à un électron

- Hydrogène
- Alcalins
- Structures fine et hyperfine

### Interaction atome-rayonnement

- Hamiltonien d'interaction semi-classique
- Atome à un électron dans un champ électrique ou magnétique statique
- Transitions induites par un champ électromagnétique : approximation dipolaire-électrique et termes d'ordre supérieur
- Règles de sélection
- Coefficients d'Einstein

### Atomes complexes

- Hamiltonien et fonction d'onde à plusieurs électrons
- Couplages L-S et j-j
- Règles de sélection des transitions dipolaires électriques

### Molécules diatomiques

- Approximation de Born-Oppenheimer
- Potentiel d'interaction nucléaire
- Energies et fonctions d'onde électroniques, symétries
- Orbitales moléculaires : méthode LCAO
- Mouvement nucléaire : vibration
- Transition verticales, principe de Franck-Condon, spectres moléculaires

## Prérequis

Cours de mécanique quantique. Notion d'observable, hamiltonien, valeurs propres et vecteurs propres, composition des moments cinétiques, particule dans un potentiel central, notions sur les symétries et les lois de conservation, théorie des perturbations stationnaires, particules indiscernables.

## Ouvrages de référence

- *Physics of atoms and molecules*, B.H. Brandsen et C.J. Joachain, Ed. Longman.
- *Spectroscopie Atomique*, E. Biémont, Ed. De Boeck Université
- *Spectroscopie Moléculaire*, E. Biémont, Ed. De Boeck Université
- *Physique atomique*, B. Cagnac, L. Tchang-Brillet et J.C. Pebay-Peyroula, tomes 1 et 2, Ed. Dunod.

## Informations pratiques

**Crédits**  
6 ECTS

### Modalités d'enseignement

L'UE est enseignée à distance au second semestre.

### Modalités d'évaluation

- au cours du semestre, trois devoirs "à la maison", de moyenne DM
- en première session, une épreuve écrite, de note E1

La note finale de l'UE est  $N = \sup(E1 ; 0,7 * E1 + 0,3 * DM)$ .

En seconde session, une épreuve écrite E2 remplace la note E1 dans la formule précédente.

### Responsable de l'UE

Mathieu Bertin

Adresse : MONARIS, Sorbonne Université - Campus Pierre et Marie Curie, tour 32-33, 3e étage - 4  
Place Jussieu 75252 Paris cedex 05

Courriel : [mathieu.bertin@sorbonne-universite.fr](mailto:mathieu.bertin@sorbonne-universite.fr)