

Spectroscopies vibrationnelles: vers un partenariat expérience-théorie

Benoît CHAMPAGNE

Le chimiste fabrique de nouvelles molécules dont les structures et propriétés sont sondées par différentes techniques spectroscopiques basées sur des phénomènes électroniques, optiques, ou magnétiques. Les spectroscopies vibrationnelles occupent une place particulière car elles fournissent une information très dense associée aux nombreux degrés de liberté moléculaires. Si l'absorption IR et la diffusion Raman sont des techniques couramment utilisées au Laboratoire - et donc pour lesquelles il existe des bases de données pour interpréter les spectres - de nombreux autres phénomènes permettent de révéler les mouvements vibratoires et les propriétés moléculaires associées. Parmi ceux-ci, des phénomènes non-linéaires comme la diffusion hyper-Raman et la génération de fréquence-somme, des phénomènes liés à la chiralité comme le dichroïsme circulaire vibrationnel et l'activité optique Raman vibrationnelle et encore des phénomènes résonants comme le Raman résonant et la génération de fréquence-somme doublement résonante.

L'exposé abordera ces différentes *nouvelles* spectroscopies vibrationnelles sous l'angle d'un partenariat entre l'expérience et la théorie : D'une part, la mise au point d'approches théoriques requiert une étroite interaction avec l'expérience, d'autre part, les spectres vibrationnels sont tellement riches en informations que l'utilisation de l'outil théorique permet souvent d'en appréhender davantage.