

LICENCE MENTION PHYSIQUE, CHIMIE

PARCOURS PHYSIQUE ET CHIMIE

Semestre 5

Chimie quantique

Présentation

Responsable de l'UE : Antony MEMBOEUF

3 crédits ECTS

Volume horaire

Cours Magistral : 16h

Travaux Dirigés : 10h

Pré-requis nécessaires

Chimie générale (L1-S1) Mathématiques (L1-S1/S2) Chimie-Physique 1 (L2-S3)

Compétences visées

Connaitre les conditions ayant nécessité l'émergence de la théorie quantique (expériences clefs et échecs théoriques). Connaitre le formalisme de base de la théorie quantique (approche ondulatoire et opérationnelle). Maîtriser le modèle quantique décrivant atomes et molécules simples. Connaitre les étapes conduisant à la résolution de l'équation de Schrödinger pour un système hydrogénoïde. Savoir interpréter l'expression mathématique des orbitales atomiques et les différentes fonctions de densité électronique. Connaitre les théories de Heitler-London et des orbitales moléculaires.

Modalités de contrôle des connaissances

Session 1 ou session unique - Contrôle de connaissances

Nature de l'enseignement	Modalité	Nature	Durée (min.)	Coefficient	Remarques
Cours Magistral	CT	Ecrit - devoir surveillé	90	1	

Session 2 : Contrôle de connaissances

Nature de l'enseignement	Modalité	Nature	Durée (min.)	Coefficient	Remarques
Cours Magistral	CT	Ecrit - devoir surveillé	75		