

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 : 10h

Travaux Dirigés : 16h

### 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		