LICENCE MENTION PHYSIQUE, CHIMIE

## PARCOURS CHIMIE

**Semestre 5**

# Chimie physique 3 : Chimie théorique

## Présentation

Responsables de l'UE : Antony MEMBOEUF

**6 crédits ECTS**

Volume horaire

Cours Magistral : 22h
Travaux Dirigés : 18h
Travaux Pratiques : 15h

## Pré-requis nécessaires

Chimie générale (L1-S1) Mathématiques (L1-S1/S2) Chimie-Physique 1 (L2-S3) Chimie-Physique 2 (L2-S4)

## Compétences visées

Connaître le contexte historique ayant conduit à l'émergence de la théorie quantique. Connaître le formalisme de base et les principes de la théorie quantique (approche ondulatoire et opérationnelle). Connaître 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. Connaître les théories de Heitler-London et des orbitales moléculaires. Savoir faire le lien entre ces théories, la structure et la réactivité des molécules dans des cas simples. Savoir formuler le problème électronique et l'associer à la démarche de modélisation informatique. Savoir utiliser un logiciel de visualisation moléculaire et de modélisation par les méthodes de la chimie quantique. Savoir quelles grandeurs physiques et chimiques sont accessibles grâce à la modélisation.

## Modalités de contrôle des connaissances

### Session 1 ou session unique - Contrôle de connaissances

| Nature de l'enseignement | Modalité | Nature | Durée (min.) | Coefficient | Remarques |
|---|---|---|---|---|---|
| UE | CC | Travaux Pratiques | | 1/3 | |
| UE | CT | Ecrit - devoir surveillé | 120 | 2/3 | |

### Session 2 : Contrôle de connaissances

| Nature de l'enseignement | Modalité | Nature | Durée (min.) | Coefficient | Remarques |
|---|---|---|---|---|---|
| UE | CT | Ecrit - devoir surveillé | 90 | | |