

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		