

# Licence Chimie

## Symétrie et chimie quantique 1

### Informations

Composante : Faculté des Sciences

### Responsables

Paola NAVA (Responsable inter-site et St Jérôme)  
Dmytro KANDASKALOV (Responsable Luminy)  
Stephane HUMBEL (Responsable Aix-en-Provence)

### Langue(s) d'enseignement

Français

### Contenu

- Représentations des groupes ponctuels et table de caractère.
- Orbitales de symétrie et diagrammes d'orbitales moléculaires simples (projecteurs et orbitales de symétrie).
- Ondes et particules.
- Postulats.
- Applications simples (1-Dimension, puits infini, marche et barrière finie, potentiel harmonique...).
- Introduction au formalisme de Dirac.
- Superposition d'état.

### Compétences à acquérir

- Appliquer aux problèmes chimiques les connaissances de base de la chimie quantique.
- Appliquer aux problèmes chimiques les connaissances de base de la chimie moléculaire (orbitales moléculaires sur la base des orbitales de symétrie).
- Prévoir les propriétés structurales et physico-chimiques des atomes et des molécules simples.
- Faire le lien entre les différentes disciplines et les différentes connaissances acquises dans ces disciplines (mathématiques, chimie quantique, symétrie).

5) Identifier et utiliser de manière critique les données théoriques adéquates permettant d'étayer les hypothèses émises.

### Modalités d'organisation

L'UE comporte deux parties : une partie de symétrie moléculaire et une partie d'introduction à la chimie quantique. Les deux parties s'appuient sur l'UE du S3 : « Outils mathématiques et symétrie ». L'UE est organisée en CM (24 h), TD (24 h) et 2 heures de TP sur ordinateur pour la partie symétrie.

### Bibliographie, lectures recommandées

- « Chimie Physique », P. W. Atkins
- "Introduction à la chimie quantique", Claude Leforestier
- "Mécanique quantique", Christophe Texier
- La théorie des groupes en chimie, F. Volatron, P. Chaquin, Ed : Deboeck supérieur 2017.

### Pré-requis obligatoires

- Atomistique (Portail Curie UE SLC1U06 ; ou Pasteur UE SLP2U04).
- Représentation de molécules (Portail Curie UE SLC1U07 ; ou Pasteur UE SLP1U03) .
- UE du premier et deuxième semestre d'Outils mathématiques du Portail (Portail Curie UE SLC1U08, SLC1U15 et SLC2U16; ou Pasteur, UE SLP1U04 et SLP2U03).
- UE de S3 : « Outils mathématiques et symétrie » (UE SCH3U15).

### VOLUME HORAIRE

- Volume total: 50 heures

- Cours magistraux: 24 heures
- Travaux dirigés: 24 heures
- Travaux pratiques: 2 heures

### Codes Apogée

- SCH4U18A [ELP]
- SCH4U18L [ELP]
- SCH4U18J [ELP]

### Pour plus d'informations

[Aller sur le site de l'offre de formation...](#)



Dernière modification le 13/06/2024