

Licence Chimie

Chimie quantique 2

Informations

Composante : Faculté des Sciences

Responsables

Vincent LEDENTU (Responsable inter-site et St Jérôme)
Frederic BIASO (Responsable Luminy)

Langue(s) d'enseignement

Français

Contenu

- Motivations et rappels de mécanique quantique.
- La molécule quantique : du gaz macroscopique à la molécule isolée ; séparabilité noyaux-électrons ; surfaces d'énergie potentielle ; modèles, énergies et fonctions d'onde nucléaires.
- Fonctions d'onde électroniques : notation de Dirac, contraintes physiques et approximations, méthode de Hückel.
- L'atome hydrogénoïde : particule sur 1 cercle ; particule sur 1 sphère ; potentiel central.

Compétences à acquérir

- Appliquer aux problèmes chimiques les connaissances de base de la chimie : chimie structurale, analytique, inorganique, organique, physique, moléculaire, thermodynamique, cinétique, ...
- Identifier les fonctions et atomes, nommer les composés chimiques dans la nomenclature appropriée et les représenter de manière à faire apparaître la spécificité de leur structure.
- Ecrire et étudier les réactions chimiques (cinétique et thermodynamique, d'une réaction chimique)
- Prévoir les propriétés structurales et physico-chimiques des atomes et des molécules simples
- Ecrire un mécanisme réactionnel type correspondant à une transformation chimique associée à une grande classe de réactions
- Faire le lien entre les différentes disciplines et les différentes connaissances acquises dans ces disciplines
- Expliquer les propriétés physico-chimiques des composés chimiques en utilisant des modèles théoriques
- Identifier et utiliser de manière critique les données expérimentales/théoriques adéquates permettant d'étayer les hypothèses émises

Modalités d'organisation

16h CM, 24h TD

Remarque : 4h TP complètent cet enseignement (UE Pratique Expérimentale 4, S5).

Bibliographie, lectures recommandées

Leforestier - Introduction à la chimie quantique, Ed. Dunod, 2005

Pré-requis obligatoires

UE Outils formels

UE Symétrie et chimie quantique 1

UE Outils mathématiques et symétrie

UE Méthodes spectroscopiques et analytiques 1 ; Méthodes spectroscopiques et analytiques 2

UE thermochimie et chimie des solutions

UE mécanismes réactionnels 1, mécanismes réactionnels 2

Prérequis recommandés

Anglais ; logiciel de traitement de texte

VOLUME HORAIRE

- Volume total: 40 heures
- Cours magistraux: 16 heures
- Travaux dirigés: 24 heures

Codes Apogée

- SCH5U24L [ELP]
- SCH5U24J [ELP]

Pour plus d'informations

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



Dernière modification le 13/06/2024