

## Ch 605

### Chimie Quantique

Nbre d'ECTS : 6

Volume horaire global: CM : 18h ; TD : 22h30 ; TP : 13h30

Volume horaire détaillé: CM : 12 séances de 1h30

TD : 15 séances de 1h30

TP : 3 séances de 4h30

### Objectifs pédagogique et descriptif des enseignements

Présentation et consolidation des notions essentielles en chimie quantique. La démarche pédagogique propose une progression de l'atome monoélectronique à la structure électronique de molécules.

### Contenu

#### A- Cours magistral :

- 1- Introduction à la mécanique quantique.
- 2- Atome d'hydrogène et ions hydrogénoïdes.
- 3- Atomes polyélectroniques, termes spectroscopiques.
- 4- Molécules diatomiques.
- 5- Molécules polyatomiques.
- 6- Molécules polyatomiques conjuguées, méthode de Huckel.
- 7- Applications à la réactivité.

#### B- Travaux Dirigés :

Les TD correspondent à un travail encadré, illustrant les thèmes abordés en CM. Les séances de TD serviront de support aux contrôles continus et à l'examen final.

#### C- Travaux Pratiques :

Les TP ont pour objectif de calculer la structure électronique de molécules (modèle du puits de potentiel et de Hückel) à l'aide de logiciels adaptés. Les propriétés spectrales de molécules simples seront illustrées par l'étude d'un phénomène de chimiluminescence.

### Evaluation

Examen écrit : 60% / Contrôle continu : 20% / Travaux pratiques : 20%