Liaison chimique et modélisation

Composante
École Nationale Supérieure des Ingénieurs en Arts Chimiques

Volume horaire
27,33h

En bref

- **Code ELP:** A1B3F
- **Ouvert aux étudiants en échange:** Oui

Présentation

Objectifs

Compréhension à l'échelle atomique de la structure des molécules par résolution de l'équation de Schrödinger pour des cas simples. Détermination de relations entre cette structure, les propriétés de la matière et les processus chimiques afin d'aider les expérimentateurs à interpréter leurs résultats.

Pré-requis obligatoires

Notions de mathématiques sur résolution équations second et troisième degré

Syllabus

- Notions de Mécanique Quantique
- Approche Hartree-Fock / Huckel
- Orbitales Moléculaires, liaisons chimiques
- Réactivité

Informations complémentaires

Informations non contractuelles.
Dernière mise à jour le 20 septembre 2024

Cours / TD

Bibliographie

Eléments de chimie quantique, à l'usage des chimistes, JL Rivail, 2000, CNRS Editions

Informations non contractuelles.
Dernière mise à jour le 20 septembre 2024