

# Liaison chimique et modélisation



Composante  
École Nationale  
Supérieure des  
Ingénieurs en  
Arts Chimiques



Volume horaire  
27,33h

## En bref

- > **Code:** LP196VNH
- > **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

## Bibliographie

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