

Physicochimie Quantique Moléculaire



Composante
École Nationale
Supérieure des
Ingénieurs en
Arts Chimiques



Volume horaire
25,33h

En bref

- > **Code:** LP19ACG6
- > **Ouvert aux étudiants en échange:** Oui

Présentation

Objectifs

Comprendre à l'échelle atomique et grâce à des calculs de physico-chimie quantique la formation de systèmes moléculaires.

Faire le lien avec les données expérimentales disponibles dans la bibliographie.

Syllabus

Théorie des groupes, méthodes de calcul quantique (Approches Hartree-Fock / Huckel), atomistique et liaison chimique : application aux systèmes moléculaires

Informations complémentaires

Cours / TD

Bibliographie

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