

Chimie quantique / Quantum chemistry

 Composante
Polytech
Grenoble - INP,
UGA

- › **Langue(s) d'enseignement:** Français
- › **Ouvert aux étudiants en échange:** Oui
- › **Code d'export Apogée:** KAMA5M10

Présentation

Description

- Introduction à la mécanique quantique
- Présentation des techniques spectroscopiques
- Applications à la structure atomique et aux propriétés dynamiques des molécules (vibration et rotation).

1 Postulats de la mécanique quantique et applications en chimie

2 Étude de systèmes simples

2.1 Particule dans une boîte de potentiel

2.2 Oscillateur harmonique

2.3 Rotateur rigide plan

2.4 Rotateur rigide

3 Introduction aux spectroscopies

3.1 UV

3.2 Visible

3.3 IR

3.4 Raman

4 Étude des orbitales hydrogénoïdes

4.1 Modèle des électrons indépendants

4.2 Classification périodique des éléments

5 Modèle vectoriel de l'atome

Notions de base

- Introduction to quantum mechanics
- Presentation of spectroscopic techniques
- Applications to atomic structure and dynamic properties of molecules (vibration and rotation).

1 Postulates of quantum mechanics and applications in chemistry

2 Study of simple systems

2.1 Particle in a box of potential

2.2 Harmonic oscillator

2.3 Rigid Rotator Plan

2.4 Rigid Rotator

3 Introduction to spectroscopy

3.1 UV

3.2 Visible

3.3 IR

3.4 Raman

4 Study of hydrogenoid orbitals

4.1 Model of independent electrons

4.2 Periodic classification of the elements

5 Vector model of the atom

Basics

Heures d'enseignement

Chimie quantique / Quantum chemistry - CMTD

Cours magistral - Travaux dirigés

16h

Pré-requis recommandés

- Connaissances de base (niveau 1er cycle) en chimie physique
- Calcul différentiel et intégral, notions sur les vecteurs, nombres complexes et déterminants

- Basic knowledge (1st cycle level) in physical chemistry
- Differential and integral calculus, notions on vectors, complex numbers and determinants

Période : Semestre 5

Évaluation initiale / Session principale - Épreuves

Libellé	Nature de l'enseignement	Type d'évaluation	Nature de l'épreuve	Durée (en minutes)	Nombre d'épreuves	Coefficient de l'épreuve	Remarques
						30/100	

Bibliographie

- Chimie Physique - Approche moléculaire. D.A.McQuarrie, J.D.Simon, Dunod 2000
- Liaison chimique et spectroscopie M. Chabanel, P. Gressier, Collection Ellipse 1991
- Éléments de chimie quantique. J.L. Rivail InterEdition / Éditions du CNRS 1991

Infos pratiques

Lieu(x) ville

- > Grenoble
-

Campus

- > Grenoble - Saint-Martin d'Hères