**Semestre : 4**

**UE : Fondamentale**

**Matière : Chimie Quantique**

**Objectifs de l’enseignement**

Ce cours permettra à l’étudiant de s’apercevoir comment les concepts fondamentaux de la Mécanique Quantique sont utilisés à l’échelle de la structure atomique et moléculaire pour l'interprétation et la prévision des réactivités et des propriétés des espèces chimiques Connaissances préalables recommandées Il est recommandé de maîtriser la matière « Chimie 1 & 2 » enseignées en L1, Science de la Matière.

**Contenu de la matière:**

**Chapitre 1 : Principes généraux de la mécanique quantique**. 9h00

Introduction aux idées de base de la théorie quantique. L’état quantique : la fonction d’onde. Propriétés observables et opérateurs quantiques. L’évolution temporelle d’un système quantique: équation de Schrödinger dépendante du temps, système conservateur de l’énergie, équation de Schrödinger indépendante du temps, état fondamental et états excités. Mesure d’une propriété et valeur moyenne. Principe d’incertitude

**Chapitre 2 : Modèle de la particule libre dans une boite. 6H00**

Boîte de potentiel à une dimension. Boîte de potentiel à 2 et 3 dimensions. Application : modélisation de la structure des électrons π des polyènes

**Chapitre 3 : Les atomes hydrogénoïdes. 9h**

Hamiltonien, équations de Schrödinger dépendante et indépendante du temps. Résolution de l’équation de Schrödinger. Analyse et interprétation des solutions. Introduction du spin :spinorbitale

**Chapitre 4 : Les méthodes d’approximation en mécanique quantique 3h**

Méthode des perturbations. Méthode des variations

**Chapitre 5 : Les atomes à plusieurs électrons. 9h**

Hamiltonien et équation de Schrödinger. Approximation orbitélaire. Principe de Pauli. Modèle de Slater. Structure électronique des atomes

**Chapitre 6 : Les molécules diatomiques. 9h**

L’ion moléculaire H2+, approximation CLOA. Interaction de deux orbitales atomiques identique : les molécules diatomiques homonucléaires, Interaction de deux orbitales atomiques différentes : les molécules diatomiques hétéronucléaires.

**Mode d’évaluation**: Continu : 33%Examen : 67%

**Références**

(Livres et polycopiés, sites internet, etc):

* B. VIDAL, Chimie Quantique, Ed. Masson, (1992).
* D. Mac QUARRIE, J. D. SIMON, Chimie physique: approche moléculaire, Ed. Dunod, (2000).
* P. HIBERTY, N. T. ANH, Introduction à la chimie quantique,Ed. Ecole Polytechnique, (2008)
* C. LEFORESTIER, Introduction à la chimie quantique, Cours et exercices corrigés, Ed.Dunod, (2005).