



3.00 crédits	22.5 h + 7.5 h	Q1
--------------	----------------	----

Enseignants	Champagne Benoît (supplée Hautier Geoffroy) ;Hautier Geoffroy ;
Langue d'enseignement	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Préalables	<i>Le(s) prérequis de cette Unité d'enseignement (UE) sont précisés à la fin de cette fiche, en regard des programmes/formations qui proposent cette UE.</i>
Thèmes abordés	Le cours propose une initiation à la chimie quantique c'est-à-dire à l'utilisation de principes de mécanique quantique pour calculer les propriétés de molécules et solides. Le cours présente les théories les plus importantes du domaine en partant d'Hartree-Fock et en étendant vers des approches plus modernes (post-Hartree-Fock et théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)). Le cours donne aussi une initiation à l'utilisation par l'étudiant de logiciels modernes de chimie quantique.
Acquis d'apprentissage	<b>A la fin de cette unité d'enseignement, l'étudiant est capable de :</b>  Ce cours est destiné à initier les étudiants en chimie aux notions élémentaires de chimie quantique et à leur application aux problèmes rencontrés par les chimistes. 1 Il ne se limite pas à un enseignement formel, mais inclura également une initiation à la pratique de la discipline.
Modes d'évaluation des acquis des étudiants	Les étudiants sont évalués au travers d'un projet à effectuer au cours de l'année et pour lequel ils doivent remettre un rapport. Un examen oral évalue par ailleurs les connaissances théoriques et pratiques de l'étudiant au travers notamment de questions portant sur le projet mais aussi sur toute la matière abordée.
Contenu	Le cours mélange séance de théorie et exercices sur ordinateur (utilisant des logiciels modernes de chimie quantique). Une introduction à l'utilisation de Linux est aussi fournie. Nous démarrons avec un rappel sur Hartree-Fock suivi par l'exposé des méthodes modernes post-Hartree-Fock (configuration interaction, coupled cluster,...) et finissons par la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). A côté des concepts théoriques, des exemples de quantités calculables par chimie quantique (énergies, structures, barrières d'énergie, ...) seront donnés. Le but du cours est d'exposer non seulement les théories importantes mais aussi de fournir un minimum de bases pratiques pour que l'étudiant puisse effectuer des calculs de chimie quantique en évaluant leur qualité et en restant critique par rapport aux résultats.
Ressources en ligne	Site moodle disponible : <a href="https://moodle.uclouvain.be/">https://moodle.uclouvain.be/</a>
Autres infos	<b>Préalables :</b> - Notions de base de chimie générale, organique et inorganique (cours de 1 <sup>e</sup> et 2 <sup>e</sup> années du baccalauréat). - Chimie physique moléculaire (LCHM 1252)
Faculté ou entité en charge:	CHIM

<b>Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)</b>				
Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Master [120] en sciences chimiques	CHIM2M	3		
Approfondissement en sciences chimiques	APPCHIM	3	LPHY1203	
Master [60] en sciences chimiques	CHIM2M1	3		