



SC

CHIM2182 Chimie quantique II

[22.5h+0h exercices] 2.5 crédits

Cette activité se déroule pendant le 1er semestre

**Enseignant(s):** Daniel Peeters  
**Langue d'enseignement :** français  
**Niveau :** cours de 2ème cycle

### Objectifs (en terme de compétences)

Ce cours est destiné à initier les étudiants en chimie aux notions plus avancées de chimie quantique et à leur application aux problèmes rencontrés par les chimistes.

### Objet de l'activité (principaux thèmes à aborder)

Présentation des méthodes permettant d'atteindre la fonction d'onde des états moléculaires suivie de leur utilisation dans l'interprétation des phénomènes chimiques notamment dans les spectroscopies et théories de la réactivité chimique.

### Résumé : Contenu et Méthodes

#### Résumé

Le cours introduit les méthodes permettant de décrire la corrélation électronique (MPn, CI, MCSCF). Ces notions sont appliquées à l'étude des états excités, de leur optimisation et de leur relation avec les spectroscopies électroniques. La thermochimie et la cinétique des réactions (moléculaires, ioniques, radicalaires) est ensuite abordée.

#### Méthode d'enseignement et apprentissage

Le cours comprend des exposés théoriques suivis d'étude de cas concrets recourant aux logiciels de simulation et au calcul sur ordinateur

### Autres informations (Pré-requis, Evaluation, Support, ...)

Pré-requis : Introduction à la chimie quantique

Mode d'évaluation : Examen écrit

Support : Plan détaillé du cours + ouvrages de référence

### Autres crédits de l'activité dans les programmes

CHIM22                      Deuxième licence en sciences chimiques                      (2.5 crédits)