



## CHIM2181 Chimie quantique I

[22.5h+0h exercices] 2 crédits

Ce cours n'est pas dispensé en 2006-2007

Cette activité se déroule pendant le 1er semestre

**Enseignant(s):** Daniel Peeters  
**Langue d'enseignement :** français  
**Niveau :** Deuxième cycle

### Objectifs (en termes de compétences)

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. Il ne se limite pas à un enseignement formel, mais inclura également une initiation à la pratique de la discipline.

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

Initiation des étudiants en chimie au formalisme de la chimie quantique. Présentation des méthodes mono et poly configurationnelles suivi de leur utilisation dans le calcul des propriétés moléculaires structurales, électroniques et énergétique et dans la détermination des mécanismes réactionnels.

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

Pré-requis : Chimie générale et les bases de la chimie physique moléculaire (CHIM 1180) Mode d'évaluation : Examen écrit  
Support : Structure détaillée du cours + ouvrages de référence

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

CHIM22 Deuxième licence en sciences chimiques (2 crédits)