

## Physicochimie Quantique Moléculaire

 Composante  
École Nationale  
Supérieure des  
Ingénieurs en  
Arts Chimiques



 Volume horaire  
25,33h

### En bref

- **Code:** LP19ACG6
- **Ouvert aux étudiants en échange:** Oui

## Présentation

### Objectifs

Comprendre à l'échelle atomique et grâce à des calculs de physico-chimie quantique la formation de systèmes moléculaires.

Faire le lien avec les données expérimentales disponibles dans la bibliographie.

### Syllabus

Théorie des groupes, méthodes de calcul quantique ( Approches Hartree-Fock / Huckel), atomistique et liaison chimique : application aux systèmes moléculaires

### Informations complémentaires

Cours / TD

### Bibliographie

Eléments de chimie quantique à l'usage des chimistes, JL Rivail, 2000, CNRS Editions.