

Chimie quantique en sciences moléculaires

#	Niveau d'étude Bac +3	#	ECTS crédits	#	Composante Sciences Fondamentales et Appliquées	#	Volume horaire 50.0	#	Période de l'année Semestre 5
---	--------------------------	---	-----------------	---	--	---	------------------------	---	-------------------------------------

En bref

- # **Méthode d'enseignement:** En présence
- # **Ouvert aux étudiants en échange:** Non

Présentation

Description

- Introduction à la chimie quantique
- Théorie des groupes en chimie moléculaire
- Méthode de fragmentation et théorie des Orbitales moléculaires.
- Réactivité et sélectivité en chimie moléculaire. Théorie des orbitales frontières. Règles de Woodward-Hoffmann.

Objectifs

Application de la théorie des groupes en chimie moléculaire. Constructions de diagrammes d' OM pour la compréhension des propriétés structurales et électroniques de systèmes moléculaires.

Utilisation de la théorie des orbitales frontières pour des études de réactivité et de sélectivité en chimie organique.

Heures d'enseignement

Chimie quantique en sciences moléculaires - CM	CM	30h
Chimie quantique en sciences moléculaires - TD	TD	20h

Infos pratiques

Lieu(x)

Poitiers-Campus