

# Chimie quantique en sciences moléculaires

Niveau d'étude  
**Bac +3**

ECTS  
**6 crédits**

Composante  
**Sciences  
Fondamentales  
et Appliquées**

Volume horaire  
**50h**

Période de l'année  
**Semestre 5**

## En bref

# **Méthode d'enseignement:** En présence

# **Ouvert aux étudiants en échange:** Non

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
--	----	-----

## 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.

## Infos pratiques

### Lieu(x)

# Poitiers-Campus