



[22.5h+0h exercices] 2.5 crédits

Cette activité se déroule pendant le 2ème semestre

Enseignant(s): Jean-Paul Declercq
Langue d'enseignement : français
Niveau : cours de 2ème cycle

Objet de l'activité (principaux thèmes à aborder)

1. Compléments de théorie des groupes et applications chimiques : espaces fonctionnels et opérateurs de transformation ; équivalence de représentations ; théorème de grande orthogonalité ; construction des tables de caractères ; opérateur de projection ; produit direct de représentations ; les intégrales nulles ; vibrations moléculaires : symétrie de l'état de base et des niveaux fondamentaux, assignation des modes normaux par l'opérateur de projection ; construction d'orbitales hybrides, symétrie des orbitales moléculaires ; diagrammes d'énergie qualitatifs ; tables de corrélation ; application de la symétrie aux réactions chimiques.
2. Aspects de chimie structurale : méthodes empiriques de modélisation moléculaire : minimisation d'énergie, exploration de l'espace conformationnel, dynamique moléculaire, graphique moléculaire ; compléments de cristallographie : exploitation des bases de données cristallographiques, résolution et affinement de structures, diffusion des rayons X aux petits angles et caractérisation de polymères.

Résumé : Contenu et Méthodes

1. Compléments de théorie des groupes et applications chimiques : espaces fonctionnels et opérateurs de transformation ; équivalence de représentations ; théorème de grande orthogonalité ; construction des tables de caractères ; opérateur de projection ; produit direct de représentations ; les intégrales nulles ; vibrations moléculaires : symétrie de l'état de base et des niveaux fondamentaux, assignation des modes normaux par l'opérateur de projection ; construction d'orbitales hybrides, symétrie des orbitales moléculaires ; diagrammes d'énergie qualitatifs ; tables de corrélation ; application de la symétrie aux réactions chimiques.
2. Aspects de chimie structurale : méthodes empiriques de modélisation moléculaire : minimisation d'énergie, exploration de l'espace conformationnel, dynamique moléculaire, graphique moléculaire ; compléments de cristallographie : exploitation des bases de données cristallographiques, résolution et affinement de structures, diffusion des rayons X aux petits angles et caractérisation de polymères.

Méthode : Cours et exercices illustrant le cours

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

Pré-requis : Introduction à la symétrie (CHIM1241A : Cristallographie)

Mode d'évaluation : oral avec préparation écrite

Autres crédits de l'activité dans les programmes

CHIM22

Deuxième licence en sciences chimiques

(2.5 crédits)