



SC

CHIM3240 Modélisation des phénomènes chimiques

[22.5h]

Ce cours bisannuel est dispensé en 2005-2006, 2007-2008,...

Langue d'enseignement : français

Niveau : cours de 3ème cycle

Objectifs (en terme de compétences)

Enseignement de troisième cycle à périodicité bisannuelle visant à familiariser l'étudiant avec la notion de modèle dans ses aspects de conception, utilisation et limitation.

Objet de l'activité (principaux thèmes à aborder)

Le contenu de cet enseignement diffèrera d'année en année et permettra d'aborder les aspects suivants :- Définition d'un modèle et précision de son domaine d'application. Les aspects physiques et chimiques seront clairement séparés de l'aspect mathématique et formel du modèle.- Présentation et discussion de quelques modèles d'intérêt chimique: Modèles moléculaires et mécanique moléculaire; modèles de réactivité et dynamique moléculaire; autres aspects de la modélisation (diffusion, électrostatique,). - Limitation et critique des modèles. Evaluation de l'adéquation du modèle.- Utilisation et intérêt des modèles.

Résumé : Contenu et Méthodes

" Physico-chimie des molécules d'intérêt biologique : Aspects théoriques et expérimentaux "

(Emprunt au Cycle interuniversitaire FNRS)

Rappel des notions de chimie quantique (8 heures). Cette partie rappelle les notions de fonction d'onde, d'énergie et d'états propres ; les méthodes usuelles de calcul des surfaces d'énergie potentielles des états fondamental, excités et ionisé complétées par leur utilisation en thermodynamique .

Modélisation du solvant et étude du milieu. (8 heures). Cette partie présente le formalisme général de l'interaction molécule cible, environnement. Une présentation du continuum polarisable, de la dynamique et mécanique moléculaire en relation avec ce thème seront proposées.

Approche expérimentale de l'organisation mésoscopique des structures ainsi que de la complexation et de la dénaturation des biomolécules (Etude cinétique et thermodynamique). (4 heures).

Analyse conformationnelle des molécules biologiques incluant les aspects Hôte/Ligand, repliement et mutagénèse dirigée des protéines en veillant à intégrer l'approche théorique et expérimentale. (6 heures)

Analyse du comportement du DNA en présentant tout particulièrement sa dénaturation par effet de charges, notamment lors de transfert de charges dans les états excités. (4 heures)

Problématique de la reconnaissance moléculaire et présentation des modèles correspondants (2 heures)

Les relations Structure/Activité et leur approche quantitative. Présentation des algorithmes ainsi que leur utilisation en recherche et développement. (4 heures)

Exposé de synthèse des diverses approches, discussion et analyse prospective de la discipline (4 heures)