

# Licence Chimie

## Chimie numérique

### Informations

Composante : Faculté des Sciences

### Responsable

Anouk SIRI (Responsable)

### Langue(s) d'enseignement

Français

### Contenu

#### Objectif

Découverte de différentes méthodes de chimie numérique

Illustrations de l'utilisation de ces méthodes en analyse conformationnelle, en spectroscopie IR et RMN, en réactivité organique et en chimie du médicament.

Méthodes de chimie numérique utilisées dans le projet pluridisciplinaire au S6.

#### Contenu

**Partie 1** : Présentation des techniques de modélisation moléculaire et notion de surface d'énergie potentielle, en coordination avec l'UE Chimie quantique 2 de S5.

**Partie 2** : La mécanique moléculaire, un modèle simple pour étudier des systèmes chimiques.

**Partie 3** : Applications de la chimie quantique aux spectroscopies IR et RMN, à la réactivité chimique

**Partie 4** : Découverte du docking pour l'étude de l'interaction ligand/protéine

**Partie 5** : Mise en situation

### Compétences à acquérir

- Appliquer aux problèmes chimiques les connaissances de base de la chimie : chimie structurale, analytique, inorganique, organique, physique, moléculaire, thermodynamique, cinétique, ...
- Expliquer les propriétés physico-chimiques des composés chimiques en utilisant des modèles théoriques
- Faire le lien entre les différentes disciplines et les différentes connaissances acquises dans ces disciplines
- Analyser et exploiter des documents scientifiques en vue de résoudre une problématique de chimie
- Résoudre un problème de chimie en mobilisant des outils informatiques Rédiger un compte-rendu clair (en français ou en anglais) et ordonné (en français ou en anglais) d'une étude sur ordinateur
- Communiquer de façon rigoureuse en faisant preuve d'esprit de synthèse et d'esprit critique
- 

### Modalités d'organisation

L'enseignement se déroule en 10 séances de 3h en salle informatique.

**Parties 1-4** : 8 séances de cours/TD intégrés (24h) en salle informatique

afin d'acquérir des connaissances et des compétences de base en chimie numérique.

Une semaine sans enseignement est recommandée entre les Parties 1-4 et 5 pour laisser aux étudiants le temps de faire leur choix de sujet pour la mise en situation.

**Partie 5** : 2 séances de mise en situation en salle informatique (6h). Les étudiants se répartissent en groupes de 3 à 4 et choisissent un sujet parmi les thèmes abordés pendant les cours/TD des Parties 1-4 (spectroscopie RMN ou infrarouge, réactivité en chimie organique, thermochimie, matériaux inorganiques, médicaments, ...). Ils ont alors accès à une publication scientifique présentant des résultats expérimentaux et théoriques. Suivant les consignes des enseignants, ils reproduisent tout ou partie des calculs de modélisation sur ordinateur.

Les étudiants rendent un rapport et présentent à l'oral le contexte de la publication et leurs résultats qu'ils compareront à ceux de la publication.

### Bibliographie, lectures recommandées

Introduction à la chimie quantique. C. Leforestier. 2005. Dunod.

### Pré-requis obligatoires

Structure de la matière (L1), Symétrie et chimie quantique 1 (L2), Méthodes spectroscopiques (L2), Thermochimie (L2), Cinétique chimique (L2)

### VOLUME HORAIRE

- Volume total: 30 heures
- Cours magistraux: 10 heures
- Travaux dirigés: 20 heures

### Codes Apogée

- SCH5U28J [ELP]

### Pour plus d'informations

[Aller sur le site de l'offre de formation...](#)



Dernière modification le 13/06/2024