



Modélisation en chimie CPES



Niveau d'étude
BAC +2



ECTS
2 crédits



Structure de
formation
Faculté des
Sciences

Présentation

Description

Cette UE suivie uniquement par les étudiants de la voie Sciences de la matière du CPES. Elle comprend une partie mathématique et une partie chimique, autour de la notion de groupe de symétrie (d'une molécule chimique) et son application à la détermination des orbitales moléculaires par combinaison linéaire d'orbitales atomiques.

Programme indicatif :

initiation à la théorie des groupes, groupes finis, groupes de symétrie de molécules

représentations linéaires de groupes, théorie des caractères et applications aux orbitales moléculaires ou aux modes de vibration d'une molécule

Pré-requis obligatoires

Ce cours s'appuie fortement sur l'enseignement d'algèbre linéaire de première année et sur les compléments d'algèbre linéaire qui ont lieu en parallèle.

Contrôle des connaissances

examen terminal