

3.00 crédits	30.0 h + 30.0 h	Q1
--------------	-----------------	----

Enseignants	Bieliavsky Pierre ;Caprace Pierre-Emmanuel ;Vitale Enrico ;
Langue d'enseignement	Français
Lieu du cours	Louvain-la-Neuve
Préalables	Notions de mathématiques telles que visées par les cours LMAT1101 et LMAT1102
Thèmes abordés	<p>Le cours de Mathématiques appliquées à la chimie aborde et développe les outils mathématiques nécessaires à la compréhension de la chimie physique en complément et approfondissement de ceux déjà abordés dans les cours de bloc 1.</p> <p>Ce cours inclut notamment les notions d'algèbre linéaire, théorie spectrale, équations différentielles linéaires et théorie des groupes nécessaires à la chimie quantique et à la spectroscopie.</p>
Acquis d'apprentissage	<p>A la fin de cette unité d'enseignement, l'étudiant est capable de :</p> <p><u>Contribution de cette UA aux acquis d'apprentissage généraux du programme de bachelier en chimie :</u></p> <ol style="list-style-type: none"> Maitriser un ensemble de « savoirs scientifiques » permettant de résoudre des problématiques de chimie <ol style="list-style-type: none"> Identifier et utiliser de manière critique les connaissances « essentielles » des sciences fondamentales : biologie, chimie, mathématique, physique pour résoudre une problématique donnée Reproduire une démarche scientifique, théorique ou expérimentale, complète appliquée à l'appréhension, à l'analyse ou au développement d'une réaction chimique <ol style="list-style-type: none"> Définir une problématique en des termes scientifiques rigoureux Intégrer les connaissances acquises pour la formulation du problème en termes d'hypothèses permettant de proposer une solution pertinente au problème de chimie posé Apprendre et agir de manière autonome <ol style="list-style-type: none"> Intégrer de manière autonome de nouvelles connaissances et compétences Gérer de façon autonome sa formation et l'organisation de son travail S'auto-évaluer en connaissant ses compétences et les limites de sa propre expertise. <p><u>Acquis d'apprentissage spécifiques : à la fin de cette UA, l'étudiant est capable de :</u></p> <ol style="list-style-type: none"> Manipuler les nombres complexes et interpréter géométriquement les opérations et les concepts principaux. Utiliser les fondamentaux d'algèbre linéaire (espaces et sous-espaces vectoriels réels ou complexes, bases et dimension, applications linéaires et matrices) en relation avec des exemples en sciences fondamentales. Voir la pertinence de ces notions en chimie via l'analyse de situation concrètes : résolution de systèmes d'équations linéaires en dimension finie et résolution d'équations d'évolution des concentrations en cinétique chimique. Apprécier le rôle de la théorie des opérateurs linéaires hermitiens et symétriques en théorie quantique. Apprendre les techniques de diagonalisation d'opérateurs symétriques ou hermitiens en dimension finie pour aborder le théorème spectral. Entrevoir le théorème spectral comme outil fondamental en chimie quantique par le biais de l'analyse d'exemples en dimension infinie. Comprendre et reconnaître le groupe de symétries d'une molécule. Comprendre la notion de représentation linéaire d'un groupe fini, et de caractère d'une représentation. Comprendre et calculer la décomposition en composantes irréductibles de représentations qui interviennent dans l'étude de systèmes moléculaires.
Modes d'évaluation des acquis des étudiants	<p>Examen écrit comprenant des questions ouvertes qui visent à tester tant la compréhension de la matière (questions théoriques et de réflexion) que la maîtrise des techniques de calcul (questions analogues aux exercices vus en type TP).</p> <p>L'examen écrit sera complété par un examen oral facultatif, ouvert à tout étudiant.e ayant obtenu au minimum 8/20 à l'examen écrit. En cas de participation à l'examen oral, le résultat de ce dernier intervient pour 50% de la note finale.</p>

<p>Méthodes d'enseignement</p>	<p>Le cours magistral vise à introduire la théorie à partir de problèmes simples et à l'illustrer par des exercices résolus en auditoire. L'exposé magistral, le syllabus disponible en ligne, la prise de notes et leur élaboration personnelle doivent vous aider à renforcer vos capacités d'analyse et synthèse.</p> <p>Les séances TP doivent vous permettre de vous approprier des outils introduits au cours magistral par des exercices de niveau différents (calcul, réflexion, synthèse, mise en contexte, etcétera).</p> <p>Tant au cours magistral que en séance TP, vos questions sont toujours les bienvenues. Après chaque activité encadrée (cours magistral ou séance TP) un travail autonome de révision est nécessaire pour pouvoir profiter pleinement de l'activité suivante.</p> <p>Un aperçu des applications chimiques (et spécialement en chimie quantique et en cristallographie) des concepts mathématiques présentés au cours sera présenté.</p>
<p>Contenu</p>	<p>Les thèmes suivants seront abordés:</p> <ul style="list-style-type: none"> - Nombres complexes. - Algèbre linéaire : espaces et sous-espaces vectoriels, bases et dimension, calcul matriciel, théorème du rang et applications aux systèmes d'équations linéaires algébriques, déterminant et matrices inversibles, diagonalisation des opérateurs linéaires. - Théorème spectral - Equations différentielles linéaires - Théorie des groupes : groupe d'isométries d'une molécule, représentation linéaire d'un groupe, caractères, représentations irréductibles, décomposition d'une représentation en somme d'irréductibles et application aux systèmes moléculaires.
<p>Ressources en ligne</p>	<p>Site Moodle : syllabus (en trois parties), anciennes questions d'examen avec solutions détaillées, énoncés des exercices traités en TP.</p>
<p>Faculté ou entité en charge:</p>	<p>CHIM</p>

Programmes / formations proposant cette unité d'enseignement (UE)				
Intitulé du programme	Sigle	Crédits	Prérequis	Acquis d'apprentissage
Approfondissement en sciences chimiques	APPCHIM	3		