

PLAN DE COURS TRIMESTRE HIVER 2017

COURS	
Titre	Orbitales moléculaires et modélisation
Sigle	CHM514
Crédits	3
Travail personnel	3 heures/semaine
Session	Session 4

PROFESSEUR		
Nom	Bureau	Horaire de disponibilité
André Bandrauk	D1-3034	Vendredi, samedi

PLACE DU COURS DANS LE PROGRAMME		
Type de cours	Obligatoire (chimie et chimie pharmaceutique, environnement)	
Cours préalable	CPH404	
Cours concomitant	CPH504	

MISE EN CONTEXTE

1) Les structures et les réactivités des molécules peuvent être étudiées par modélisation moléculaire ; il devient primordial pour tout chimiste moderne d'être capable d'effectuer de tels calculs de bases.

OBJECTIF GÉNÉRAL

Le cours vise à : 1) Être en position de pouvoir lire et comprendre des publications scientifiques dont le sujet est en rapport avec la modélisation moléculaire. Pouvoir choisir adéquatement les méthodes de calcul appropriées pour résoudre différents problèmes.

OBJECTIFS SPÉCIFIQUES

1) Comprendre et utiliser les méthodes de calculs basées sur les orbitales moléculaires (semi-empiriques, ab-initio et DFT). Pouvoir choisir parmi les méthodes AM1, STO-3G, 3-21G, 6-31G(d), 6-31++G(dp), 6-311G... avec ou sans DFT B3LYP... Calculer des géométries de minimums et d'états de transition sur une surface d'énergie potentielle. Visualiser les vibrations et les spectres IR. Reconstruire un chemin IRC. Principe élémentaire de dynamique moléculaire et thermostat.

PLAN DE LA MATIÈRE

Hiver 2017	
Périodes	Contenu
Semaine 1 9 au 13 janvier	Lundi 9 janvier : Début des activités pédagogiques D1 – A.D. Bandrauk – Dynamique moléculaire
Semaine 2 16 au 20 janvier	TP1 – Dynamique de NaI Samedi 21 janvier : Date limite choix ou modification activités pédagogiques Samedi 21 janvier : Date limite de retrait de procédure placement stages trimestre été

Hiver 2017	
Périodes	Contenu
Semaine 3 23 au 27 janvier	D2 – A.D. Bandrauk – Symétrie orbitalaire Mercredi 25 janvier : Activités étudiantes (levée des cours de 8h30 à 22h)
Semaine 4 30 janv au 3 février	TP2 – Symétrie orbitalaire Judi 2 février au mercredi 8 février : Période de pré-choix de cours pour Été 2017
Semaine 5 6 au 10 février	D3- A.D. Bandrauk – État de transition Judi 2 février au mercredi 8 février : Période de pré-choix de cours pour Été 2017 Mardi 7 au vendredi 17 février : Entrevues de stage. Pendant cette période, aucune évaluation ne sera tenue entre 8h30 et 17h00.
Semaine 6 13 au 17 février	TP3 – État de transition Mardi 7 au vendredi 17 février : Entrevues de stage. Pendant cette période, aucune évaluation ne sera tenue entre 8h30 et 17h00. Mardi 14 au dimanche 26 février Examens périodiques ⁽¹⁾ : BIOCHIMIE, BIOLOGIE, CHIMIE, MATHÉMATIQUES, PHARMACOLOGIE avec poursuite des cours
Semaine 7 20 au 24 février	D4 La modélisation moléculaire Mardi 14 au dimanche 26 février Examens périodiques ⁽¹⁾ : BIOCHIMIE, BIOLOGIE, CHIMIE, MATHÉMATIQUES, PHARMACOLOGIE avec poursuite des cours
Semaine 8 27 fév. au 3 mars	Lundi 27 février au vendredi 3 mars : Relâche des activités pédagogiques
Semaine 9 6 au 10 mars	D5 DFT, mécanique moléculaire Mercredi 8 mars : Date ultime à laquelle les étudiantes/étudiants doivent connaître le résultat de leurs évaluations partielles

Hiver 2017	
Périodes	Contenu
Semaine 10 13 au 17 mars	TP4 : introduction à GaussView; premiers calculs Mercredi 15 mars : Date limite d'abandon des activités pédagogiques du trimestre d'hiver
Semaine 11 20 au 24 mars	TP5 Études comparatives – bases, DFT
Semaine 12 27 au 31 mars	D6 Minimisation d'énergie, état de transition
Semaine 13 3 au 7 avril	TP6 : Applications, Propriétés
Semaine 14 10 au 14 avril	Jeudi 13 avril : Dernier jour de cours et de travaux pratiques Vendredi 14 avril : Vendredi Saint - Congé universitaire
Semaine 15 17 au 21 avril	Lundi 17 avril : Lundi de Pâques – congé universitaire Mardi 18 au vendredi 28 avril : Examens de fin de trimestre
Semaine 16 24 au 28 avril	Mardi 18 au vendredi 28 avril : Examens de fin de trimestre Vendredi 28 avril : Fin des cours et des travaux pratiques Vendredi 5 mai : Date limite pour produire les résultats du trimestre d'hiver

* La faculté fera l'horaire des examens périodiques. Les examens devront se tenir sur les plages de

cours. Les grands groupes et les cours multiprogrammes ou multi-groupes pourront être mis à l'horaire des examens intras à une autre période que celle du cours, notamment le soir ou le samedi.

MÉTHODES PÉDAGOGIQUES

ÉVALUATION

1. Moyens d'évaluation
a)
b)
2. Types de questions
3. Pondération
a) 50% examen final
b) T.P. 50%
c) _____
4. Moments prévus pour l'évaluation
a) _____
b) _____

Bibliographie :

- 1) <http://adbandrauk.recherche.usherbrooke.ca> – CHM514

Plagiat

Un document dont le texte et la structure se rapportent à des textes intégraux tirés d'un livre, d'une publication scientifique ou même d'un site Internet, doit être référencé adéquatement. Lors de la correction de tout travail individuel ou de groupe une attention spéciale sera portée au plagiat, défini dans le Règlement des études comme « le fait, dans une activité pédagogique évaluée, de faire passer indûment pour siens des passages ou des idées tirés de l'œuvre d'autrui. ». Le cas échéant, le plagiat est un délit qui contrevient à l'article 8.1.2 du Règlement des études : « tout acte ou manœuvre visant à tromper quant au rendement scolaire ou quant à la réussite d'une exigence relative à une activité pédagogique. » À titre de sanction disciplinaire, les mesures suivantes peuvent être imposées : a) l'obligation de reprendre un travail, un examen

ou une activité pédagogique et b) l'attribution de la note E ou de la note 0 pour un travail, un examen ou une activité évaluée. Tout travail suspecté de plagiat sera référé au Secrétaire de la Faculté des sciences.

L'intégrité intellectuelle passe, notamment, par la reconnaissance des sources utilisées. À l'Université de Sherbrooke, on y veille!

Extrait du Règlement des études

2. Relativement aux activités pédagogiques

L'expression délit désigne d'abord tout acte ou toute manœuvre visant à tromper quant au rendement scolaire ou quant à la réussite d'une exigence relative à une activité pédagogique. Sans restreindre la portée générale de ce qui précède, est considéré comme un délit :

- a) la substitution de personnes ou l'usurpation d'identité lors d'une activité évaluée ou obligatoire;
- b) le plagiat, soit le fait, dans une activité évaluée, de faire passer indûment pour siens des passages ou des idées tirés de l'œuvre d'autrui;
- c) l'obtention par vol ou par toute autre manœuvre frauduleuse de document ou de matériel, la possession ou l'utilisation de tout matériel non autorisé avant ou pendant un examen ou un travail faisant l'objet d'une évaluation;
- d) le fait de fournir ou d'obtenir toute aide non autorisée, qu'elle soit collective ou individuelle, pour un examen ou un travail faisant l'objet d'une évaluation;
- e) le fait de soumettre, sans autorisation préalable, une même production comme travail à une deuxième activité pédagogique;
- f) la falsification d'un document aux fins d'obtenir une évaluation supérieure dans une activité ou pour l'admission à un programme.

Par plagiat, on entend notamment :

- Copier intégralement une phrase ou un passage d'un livre, d'un article de journal ou de revue, d'une page Web ou de tout autre document en omettant d'en mentionner la source ou de le mettre entre guillemets
- Reproduire des présentations, des dessins, des photographies, des graphiques, des données... sans en préciser la provenance et, dans certains cas, sans en avoir obtenu la permission de reproduire
- Utiliser, en tout ou en partie, du matériel sonore, graphique ou visuel, des pages Internet, du code de programme informatique ou des éléments de logiciel, des données ou résultats d'expérimentation ou toute autre information en provenance d'autrui en le faisant passer pour sien ou sans en citer les sources
- Résumer ou paraphraser l'idée d'un auteur sans en indiquer la source
- Traduire en partie ou en totalité un texte en omettant d'en mentionner la source ou de le mettre entre guillemets
- Utiliser le travail d'un autre et le présenter comme sien (et ce, même si cette personne a donné son accord)
- Acheter un travail sur le Web ou ailleurs et le faire passer pour sien
- Utiliser sans autorisation le même travail pour deux activités différentes (autopl plagiat)