



# Modélisation des matériaux à propriétés spécifiques



Niveau d'étude  
BAC +5



ECTS  
4 crédits



Composante  
Faculté des  
Sciences

## En bref

- › **Date de début des cours:** 1 sept. 2021
- › **Langue(s) d'enseignement:** Français
- › **Méthode d'enseignement:** En présence
- › **Organisation de l'enseignement:** Formation initiale
- › **Ouvert aux étudiants en échange:** Non

Compétences visées :

- utiliser des outils numériques de travail collaboratif
- identifier quels sont les outils de modélisation adaptés à la description des matériaux
- définir et maîtriser les spécificités de la modélisation des matériaux par rapport à la modélisation moléculaire

## Pré-requis nécessaires

Notions de modélisation moléculaire.

## Présentation

### Description

Présenter les méthodes qui permettent d'explorer les propriétés physico-chimiques des matériaux par le calcul numérique. Donner les fondements mathématiques des outils numériques présentés dans le cadre de l'UE «Modélisation» au M1 et compléter les applications abordées dans le cadre de cette UE.

**Volumes horaires\* :**

CM : 28

TD : 12

### Objectifs

### Contrôle des connaissances

Contrôle terminal écrit.

### Syllabus

I- Introduction

II- Approche quantique : méthodes moléculaires

1 .Mécanique quantique et équation de Schrödinger. 2. Les méthodes monodéterminantes. 3. Prise en compte de la corrélation électronique : les méthodes post-Hartree Fock et DFT. 4. Etude des méthodes de la fonctionnelle de la densité (DFT). Application aux propriétés structurales des agrégats moléculaires. 5. Effets de l'environnement. 6. Application à la spectroscopie électronique



### III- Approche quantique : les systèmes périodiques

1 .La symétrie de translation. 2. La base des fonctions de Bloch. 3. Diagramme de bandes d'énergie. 4. Exemple d'application : calcul des spectres EELS. 5. Simulation des propriétés de surface. 6. Simulation des systèmes avec défauts. 7. Phénomènes d'adsorption : interface gaz/solide.

### IV- Dynamique moléculaire : approche classique

1 .Principe de la dynamique moléculaire. 2. Les champs de forces. 3. Application : effet de l'environnement sur les spectres électroniques de molécules organiques. 4. Vers les méthodes mixtes de type QM/MM.

---

## Informations complémentaires

### Contact(s) administratif(s) :

Secrétariat Master Chimie

<https://master-chimie.edu.umontpellier.fr/>

---

## Infos pratiques

---

### Contacts

#### Responsable pédagogique

Christophe RAYNAUD

✉ [christophe.raynaud1@umontpellier.fr](mailto:christophe.raynaud1@umontpellier.fr)

---

### Lieu(x)

➤ Montpellier - Triolet