



Modélisation et Réactivité



Niveau d'étude
BAC +5



ECTS
6 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

- exploration des surfaces d'énergie potentielle
- calcul de la structure électronique de systèmes périodiques
- dynamique quantique
- calcul de propriétés spectroscopiques

Volumes horaires* :

CM : 40

TD : 20

Présentation

Description

L'objectif est d'acquérir des compétences fortes en chimie théorique par la découverte ou l'approfondissement de diverses thématiques.

Ce module est organisé en deux phases : (i) des cours-séminaires en ligne, délivrés tout au long du premier semestre ; (ii) une semaine de formation intensive au début du mois de janvier, sur l'un des sites du pôle Sud-Ouest du Réseau Français de Chimie Théorique (Bordeaux, Montpellier, Pau, Toulouse).

Les thèmes abordés sont :

- chimie quantique et relativité
- méthodes Monte-Carlo

Objectifs

Compétences visées :

- maîtriser une large palette d'outils conceptuels et numériques pour conduire des études théoriques en chimie et physico-chimie
- exploiter et analyser les résultats issus de calculs basés sur les principales méthodes de la chimie théorique
- appliquer quelques-uns des outils de base de la chimie théorique
- mettre en œuvre un projet : définir les objectifs et le contexte, réaliser et évaluer l'action, rédiger un rapport d'activités
- définir et mettre en œuvre une stratégie de modélisation numérique à partir d'un problème expérimental en chimie, ou bien aux frontières avec la physique et la biochimie



Pré-requis nécessaires

Bases de la mécanique quantique

Contrôle des connaissances

Examen terminal écrit.

Syllabus

L'objectif est d'acquérir des compétences fortes en chimie théorique par la découverte ou l'approfondissement de diverses thématiques.

Ce module est organisé en deux phases : (i) des cours-séminaires en ligne, délivrés tout au long du premier semestre ; (ii) une semaine de formation intensive au début du mois de janvier, sur l'un des sites du pôle Sud-Ouest du Réseau Français de Chimie Théorique (Bordeaux, Montpellier, Pau, Toulouse).

Les thèmes abordés sont :

- chimie quantique et relativité
- méthodes Monte-Carlo
- exploration des surfaces d'énergie potentielle
- calcul de la structure électronique de systèmes périodiques
- dynamique quantique
- calcul de propriétés spectroscopiques

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

Lieu(x)

➤ Montpellier - Triolet