



# 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](mailto:christophe.raynaud1@umontpellier.fr)

---

### Lieu(x)

➤ Montpellier - Triolet