



Modélisation Moléculaire (UE Toulouse 3)



Niveau d'étude
BAC +4



ECTS
2 crédits



Structure de
formation
Faculté des
Sciences

En bref

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

Présentation

Description

Ce module d'enseignement a pour but de fournir et d'appréhender les bases théoriques associées à certaines méthodes de modélisation que l'on trouve dans différents domaines, des « petites molécules » au vivant et aux matériaux. Ce module se propose de répondre, pour partie, à trois questions : 1) Pourquoi modéliser ? 2) Quoi modéliser ? 3) Comment modéliser ?

Volumes horaires* :

CM : 14

TP : 6

Objectifs

Compétences visées :

- Comprendre et appréhender les bases de la modélisation des macromolécules.
- Avoir un regard critique sur les travaux réalisés et publiés dans le domaine.



- Effectuer des modélisations physico-chimiques simples.

Heures d'enseignement

| | | |
|---|-------------------|-----|
| Modélisation Moléculaire (UE Toulouse 3) - TP | Travaux Pratiques | 6h |
| Modélisation Moléculaire (UE Toulouse 3) - CM | Cours Magistral | 14h |

Pré-requis obligatoires

Principes de base de la mécanique quantique

Contrôle des connaissances

Contrôle terminal écrit

Syllabus

Ce module d'enseignement a pour but de fournir et d'appréhender les bases théoriques associées à certaines méthodes de modélisation que l'on trouve dans différents domaines, des « petites molécules » au vivant et aux matériaux. Ce module se propose de répondre, pour partie, à trois questions : 1) Pourquoi modéliser ? 2) Quoi modéliser ? 3) Comment modéliser ?

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