



Simulations atomistiques



Niveau d'étude
BAC +5



ECTS
4 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

Présenter les méthodes qui permettent d'explorer les propriétés physico-chimiques des matériaux par le calcul numérique. Donner les fondements mathématiques des outils numériques associés.

I- Introduction

II- Approche quantique : méthodes moléculaires : Mécanique quantique, équation de Schrödinger, méthodes DFT.

III- Approche quantique : les systèmes périodiques

IV- Dynamique moléculaire : approche classique

Volumes horaires* :

CM : 30

TD : 10



Objectifs

Compétences visées :

- utiliser des outils numériques de travail collaboratif (wiki,...)
- 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

Heures d'enseignement

Simulations atomistiques - CM	Cours Magistral	30h
Simulations atomistiques - TD	Travaux Dirigés	10h

Pré-requis obligatoires

Base de mécanique quantique et de mécanique statistique.

Contrôle des connaissances

Contrôle terminal écrit

Syllabus

Présenter les méthodes qui permettent d'explorer les propriétés physico-chimiques des matériaux par le calcul numérique. Donner les fondements mathématiques des outils numériques associés.

I- Introduction

II- Approche quantique : méthodes moléculaires : Mécanique quantique, équation de Schrödinger, méthodes DFT.

III- Approche quantique : les systèmes périodiques

IV- Dynamique moléculaire : approche classique

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