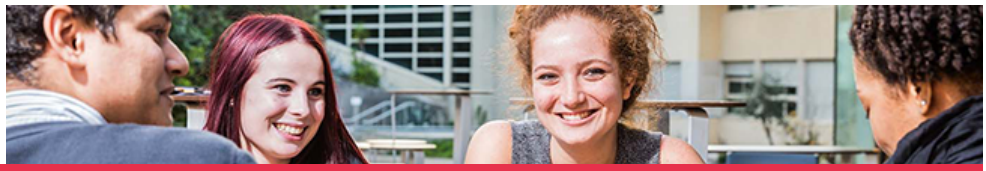

Introduction à la modélisation

Niveau d'étude
BAC +4

ECTS
2 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

Présentation

Description

Présentation générale des méthodes de calcul et modélisation les plus couramment utilisées dans le domaine de la chimie du solide selon les échelles spatiales et temporelles qui peuvent être étudiées avec elles :

(1) Calculs quantiques (Hartree Fock, méthodes Post-Hartree Fock, DFT),

(2) Modélisation à base de champs de force (atomistique et gros grain),

(3) Modélisation hybride QMMM et AACG.

Présentation des différentes techniques de calcul : calculs statiques et d'optimisation, dynamique moléculaire et Monte Carlo.

L'UE aura des cours de type CM et TP. Deux travaux pratiques de modélisation seront proposés: techniques de modélisation en mécanique classique et calculs quantiques.

CM : 11H

TD : 9H

Objectifs

L'étudiant.e connaîtra les grandes familles de techniques de modélisation les plus couramment utilisées dans le domaine du chimie du solide et saura :

(a) Quelles sont les informations qui peuvent être obtenues avec chaque technique / méthode

(b) Interpréter les résultats de calculs simples dans le contexte d'une publication scientifique.

Pré-requis nécessaires

Mécanique quantique, physique newtonienne, calcul différentiel.

Les lois de Fick (transport de la matière).

Contrôle des connaissances

Examen Terminal

Informations non contractuelles.
Dernière mise à jour le 14 février 2023

Syllabus

- Définition de modèle, d'expérience et simulation.

- Modélisation : les grandes familles, les différentes échelles qu'on peut étudier et les méthodes adaptées pour chacune. Valeur ajoutée des modélisations par rapport aux données expérimentales.

- Mécanique moléculaire :

o Champs de Force : définition, les différents types de contributions au potentiel classique, paramètres : lesquels et comment les trouver.

o Les différentes résolutions : atomistique et gros grain. Exemples de champs de force pour les deux résolutions. Différentes types d'interactions de van der Waals, modèles de charges, modèles des modes intra moléculaires. Les différentes méthodes avec lesquelles les champs de force gros grain sont développés. Interprétation critique des choix des modèles.

- Techniques de modélisation : dynamique moléculaires et Monte Carlo.

- Introduction aux techniques d'accélération d'échantillonnage.

- Introduction à la modélisation hybride : méthodes QMMM et AACG.

- Mécanique quantique.

Informations complémentaires

Contact(s) administratif(s) :

Secrétariat Master Chimie

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

Infos pratiques

Contacts

Responsable pédagogique

Mouna BEN YAHIA

mouna.ben-yahia@umontpellier.fr

Lieu(x)

- Montpellier - Triolet

Informations non contractuelles.
Dernière mise à jour le 14 février 2023