



Méthodologie de la Chimie Quantique



Niveau d'étude
BAC +5



ECTS
3 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

Ce module est une préparation à la poursuite d'études doctorales dans le domaine de la chimie théorique et spécialement dans le domaine de la chimie quantique. Les développements méthodologiques récents et le développement de logiciels de plus en plus performants ont démocratisé l'usage des logiciels de chimie quantique.

Le module contient des enseignements dans les domaines de la structure électronique et de la dynamique moléculaire. Le formalisme des différentes méthodes et leur domaine d'application seront détaillés pour permettre une utilisation éclairée des logiciels de chimie théorique et notamment quantique.

(1) structure électronique

– Hartree-Fock

– corrélation électronique, interaction de configurations, coupled cluster

– Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)

(2) dynamique nucléaire

– dynamique classique et ab initio (Car Parrinello, Born-Oppenheimer, « propagateurs », ensembles thermodynamiques, calcul d'énergie libre)

– dynamique quantique des processus photos-induits (paquet d'ondes, dynamique adiabatique et non-adiabatique, lien avec le spectre d'absorption, représentation diabatique, dynamique mixte classique-quantique)

Volumes horaires* :

CM : 10

TD : 20

Objectifs

Le but de ce module est d'exposer les concepts fondamentaux de la chimie quantique et le formalisme des méthodes les plus couramment utilisées pour la description de la structure électronique et de la dynamique nucléaire.

Compétences visées :

- utiliser de façon éclairée des logiciels de chimie théorique et modélisation et notamment de chimie quantique

- contribuer à des développements méthodologiques des principaux outils de chimie théorique.



Pré-requis nécessaires

Bases de la mécanique quantique, oscillateur harmonique quantique, orbitales moléculaires, Hückel, équations de Newton.

Contrôle des connaissances

Contrôle terminal écrit.

Syllabus

Ce module est une préparation à la poursuite d'études doctorales dans le domaine de la chimie théorique et spécialement dans le domaine de la chimie quantique. Les développements méthodologiques récents et le développement de logiciels de plus en plus performants ont démocratisé l'usage des logiciels de chimie quantique.

Le module contient des enseignements dans les domaines de la structure électronique et de la dynamique moléculaire. Le formalisme des différentes méthodes et leur domaine d'application seront détaillés pour permettre une utilisation éclairée des logiciels de chimie théorique et notamment quantique.

(1) structure électronique

– Hartree-Fock

– corrélation électronique, interaction de configurations, coupled cluster

– Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)

(2) dynamique nucléaire

– dynamique classique et ab initio (Car Parrinello, Born-Oppenheimer, « propagateurs », ensembles thermodynamiques, calcul d'énergie libre)

– dynamique quantique des processus photos-induits (paquet d'ondes, dynamique adiabatique et non-adiabatique, lien avec le spectre d'absorption, représentation diabatique, dynamique mixte classique-quantique).

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