



# Modélisation des matériaux à propriétés spécifiques



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 présentés dans le cadre de l'UE «Modélisation » au M1 et compléter les applications abordées dans le cadre de cette UE.

#### Volumes horaires\* :

CM : 28

TD : 12

### Objectifs

Compétences visées :

- utiliser des outils numériques de travail collaboratif
- 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

Modélisation des matériaux à propriétés spécifiques - TD	Travaux Dirigés	12h
Modélisation des matériaux à propriétés spécifiques - CM	Cours Magistral	28h

---

## Pré-requis obligatoires

Notions de modélisation moléculaire.

---

## Contrôle des connaissances

Contrôle terminal écrit.

---

## Syllabus

I- Introduction

II- Approche quantique : méthodes moléculaires

1. Mécanique quantique et équation de Schrödinger. 2. Les méthodes monodéterminantes. 3. Prise en compte de la corrélation électronique : les méthodes post-Hartree Fock et DFT. 4. Etude des méthodes de la fonctionnelle de la densité (DFT). Application aux propriétés structurales des agrégats moléculaires. 5. Effets de l'environnement. 6. Application à la spectroscopie électronique

III- Approche quantique : les systèmes périodiques

1. La symétrie de translation. 2. La base des fonctions de Bloch. 3. Diagramme de bandes d'énergie. 4. Exemple d'application : calcul des spectres EELS. 5. Simulation des propriétés de surface. 6. Simulation des systèmes avec défauts. 7. Phénomènes d'adsorption : interface gaz/solide.

IV- Dynamique moléculaire : approche classique

1. Principe de la dynamique moléculaire. 2. Les champs de forces. 3. Application : effet de l'environnement sur les spectres électroniques de molécules organiques. 4. Vers les méthodes mixtes de type QM/MM.

---

## 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