



Modélisation des matériaux à propriétés spécifiques



Niveau d'étude BAC +5



ECTS 4 crédits



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

nitiale

> 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

Pré-requis nécessaires

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 monodéterminantales. 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

- La symétrie de translation.
 La base des fonctions de Bloch.
 Diagramme de bandes d'énergie.
 Exemple d'application: calcul des spectres EELS.
 Simulation des propriétés de surface.
 Simulation des systèmes avec défauts.
 Phénomènes d'adsorption: interface gaz/ solide.
- IV- Dynamique moléculaire : approche classique
- Principe de la dynamique moléculaire.
 Les champs de forces.
 Application: effet de l'environnement sur les spectres électroniques de molécules organiques.
 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

Lieu(x)

> Montpellier - Triolet

