



# Modélisation et Réactivité



Niveau d'étude BAC +5



ECTS 6 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

- exploration des surfaces d'énergie potentielle
- calcul de la structure électronique de systèmes périodiques
- dynamique quantique
- calcul de propriétés spectroscopiques

#### Volumes horaires\*:

CM: 40

TD: 20

## Présentation

## Description

L'objectif est d'acquérir des compétences fortes en chimie théorique par la découverte ou l'approfondissement de diverses thématiques.

Ce module est organisé en deux phases : (i) des coursséminaires en ligne, délivrés tout au long du premier semestre ; (ii) une semaine de formation intensive au début du mois de janvier, sur l'un des sites du pôle Sud-Ouest du Réseau Français de Chimie Théorique (Bordeaux, Montpellier, Pau, Toulouse).

Les thèmes abordés sont :

- chimie quantique et relativité
- méthodes Monte-Carlo

## **Objectifs**

#### Compétences visées :

- ma##triser une large palette d'outils conceptuels et numériques pour conduire des études théoriques en chimie et physico-chimie
- exploiter et analyser les résultats issus de calculs basés sur les principales méthodes de la chimie théorique
- appliquer quelques-uns des outils de base de la chimie théorique
- mettre en œuvre un projet : définir les objectifs et le contexte, réaliser et évaluer l'action, rédiger un rapport d'activités
- définir et mettre en œuvre une stratégie de modélisation numérique à partir d'un problème expérimental en chimie, ou bien aux frontières avec la physique et la biochimie







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

## Pré-requis nécessaires

Bases de la mécanique quantique

## Contrôle des connaissances

Examen terminal écrit.

## **Syllabus**

L'objectif est d'acquérir des compétences fortes en chimie théorique par la découverte ou l'approfondissement de diverses thématiques.

Ce module est organisé en deux phases : (i) des coursséminaires en ligne, délivrés tout au long du premier semestre ; (ii) une semaine de formation intensive au début du mois de janvier, sur l'un des sites du pôle Sud-Ouest du Réseau Français de Chimie Théorique (Bordeaux, Montpellier, Pau, Toulouse).

Les thèmes abordés sont :

- chimie quantique et relativité
- méthodes Monte-Carlo
- exploration des surfaces d'énergie potentielle
- calcul de la structure électronique de systèmes périodiques
- dynamique quantique
- calcul de propriétés spectroscopiques

## Informations complémentaires

Contact(s) administratif(s) :

Secrétariat Master Chimie

# Infos pratiques

### Contacts

#### Responsable pédagogique

Christophe RAYNAUD

christophe.raynaud1@umontpellier.fr

## Lieu(x)

Montpellier - Triolet

