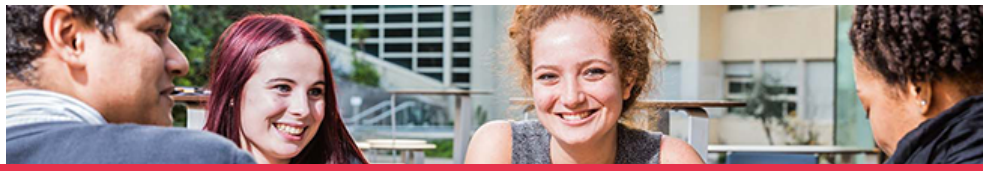

Simulations atomistiques

Niveau d'étude
BAC +5

ECTS
4 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

Présenter les méthodes qui permettent d'explorer les propriétés physico-chimiques des matériaux par le calcul numérique. Donner les fondements mathématiques des outils numériques associés.

I- Introduction

II- Approche quantique : méthodes moléculaires : Mécanique quantique, équation de Schrödinger, méthodes DFT.

III- Approche quantique : les systèmes périodiques

IV- Dynamique moléculaire : approche classique

Volumes horaires* :

CM : 30

TD : 10

Objectifs

Compétences visées :

- utiliser des outils numériques de travail collaboratif (wiki,...)

- 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

Base de mécanique quantique et de mécanique statistique.

Contrôle des connaissances

Contrôle terminal écrit

Syllabus

Présenter les méthodes qui permettent d'explorer les propriétés physico-chimiques des matériaux par le calcul numérique. Donner les fondements mathématiques des outils numériques associés.

I- Introduction

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

II- Approche quantique : méthodes moléculaires : Mécanique quantique, équation de Schrödinger, méthodes DFT.

III- Approche quantique : les systèmes périodiques

IV- Dynamique moléculaire : approche classique

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

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