

FICHE DESCRIPTIVE D'UN MODULE DE FORMATION

12-E388-02	PRATIQUE DE LA CHIMIE QUANTIQUE
-------------------	--

Initiation à la Pratique de la Chimie Quantique pour non théoriciens

Atelier Sensibilisation	Organisation : ED 388 Chimie Phys
Durée : 3 jours	Contact email : denise.depeindray@ens.fr
1 sessions/ an	20 places/session
	Recommandé en ☒ 1 ^{re} ☒ 2 ^e ☒ 3 ^e année

Objectifs

- Avoir une vue d'ensemble des méthodes standards de Chimie Quantique et de leurs possibilités.
- Maîtriser les concepts et le « jargon » utilisés en Chimie Quantique appliquée
- Être capable d'utiliser un logiciel de Chimie Quantique pour résoudre un problème courant de structure et de réactivité

Contenu

- Présentation simplifiée des méthodes Hatree-Fock, post Hartree-Fock, semi-empirique et de la DFT
- Les paramètres du calcul : fonctions de base et fonctionnelles utilisées en DFT
- Coordonnée de réaction et état de transition
- Calcul des propriétés
- Indices de réactivité

Responsable pédagogique / Formateurs

Patrick Chaquin, Professeur à l'Université Pierre et Marie Curie

Pré-requis éventuel

Pour en savoir plus (calendrier, places disponibles, etc.) : <http://www.chimie.ens.fr/ed388>

Date de mise à jour de la fiche (mois/année) : septembre 2006