

FICHE DESCRIPTIVE D'UN MODULE DE FORMATION

12-E388-03	CHIMIE QUANTIQUE CONCEPTUELLE
-------------------	--------------------------------------

Application de la Chimie Quantique conceptuelle à l'étude de la réactivité et de la réaction chimique

Atelier Approfondissement		Organisation : ED 388 Chimie Phys
Durée : 3 jours		Contact email : denise.depeindray@ens.fr
1 sessions/ an	20 places/session	Recommandé en <input checked="" type="checkbox"/> 1 ^{re} <input checked="" type="checkbox"/> 2 ^e <input checked="" type="checkbox"/> 3 ^e année

Objectifs

Donner une formation complémentaire en Chimie Quantique conceptuelle aux doctorants issus du master de Chimie Fondamentale et Appliquée spécialité Chimie Physique et Théorique.

Contenu

- Méthodes mathématique d'analyse (Théorie des systèmes dynamiques, théorie des catastrophes)
- Topologie des surfaces de potentiel, points stationnaires, coordonnée intrinsèque de réaction
- Topologie des fonctions de distribution (densité de probabilité, fonction de localisation électronique)
- DTF conceptuelle (électronégativité, dureté, mollesse, fonctions de Fukui)

Responsable pédagogique / Formateurs

Bernard Silvi, Professeur à l'Université Pierre et Marie Curie

Pré-requis éventuel

UE 410 et/ou 524 du master de Chimie Fondamentale et Appliquée ou équivalent

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