

Modélisation moléculaire



Présentation

Code interne : PC6MODEL

Description

Ce module permet d'approfondir les connaissances et compétences acquises en Chimie Quantique pour les mettre en application à travers l'utilisation de logiciels de modélisation moléculaire. Différentes applications de ces logiciels seront explorées dans les domaines de la réactivité chimique, du calcul des propriétés moléculaires, de la spectroscopie, de l'analyse de mécanismes réactionnels.

Ce module sera utile aux étudiants qui souhaitent devenir ingénieur en Recherche et Développement et qui s'orientent particulièrement dans le développement d'outils de modélisation et de simulation des propriétés physico-chimiques de la matière. Il est indispensable de suivre ce module pour suivre ensuite le module d'approfondissement CHPAN du S7.

A l'issue de ce cours les étudiants doivent :

- Maîtriser l'utilisation des logiciels modernes de chimie quantique pour des applications courantes en modélisation moléculaire.
- Savoir calculer et analyser les propriétés électroniques d'un système moléculaire.
- Savoir déterminer des chemins de réactions en calculant les paramètres thermochimiques et cinétiques associés à une réaction donnée.
- Savoir faire un choix pertinent de modélisation moléculaire et de niveau de calcul face à un problème donné.

Pré-requis obligatoires

Cours de Chimie Quantique, Thermodynamique/Cinétique.

Syllabus

Partie I : Rappels de Chimie Quantique pour la Modélisation Moléculaire (MM)


Méthodes de calculs Hartree-Fock (HF) et post-HF

Méthodes semi-empiriques, Huckel, Orbitales frontières

Densité électronique et propriétés moléculaires

élaboration d'un calcul de type MM

Partie II: TD Machines en Modélisation Moléculaire (MM)



Généralités sur les codes de MM / Apprentissage du logiciel AMPAC (Semichem)
Calculs de propriétés électroniques sur des molécules conjuguées (effets mésomères et inductifs)
Analyse de réactivité par l'utilisation de modèles de type « Orbitales frontières » ou « Huckel »
Exploration de surfaces d'énergie potentielle (recherche d'états de transition pour une série de réactions types) / Mécanismes réactionnels
Calculs de propriétés thermochimiques, cinétiques et spectroscopiques.

Bibliographie

L. RIVAIL - « Eléments de Chimie Quantique à l'usage des chimistes » (Editions du CNRS)
W. ATKINS and R.S. FRIEDMAN « Molecular Quantum Mechanics » (Oxford University Press)
N. LEVINE, « Quantum Chemistry » (Prentice Hall)

Modalités de contrôle des connaissances

Évaluation initiale / Session principale - Épreuves

Type d'évaluation	Nature de l'épreuve	Durée (en minutes)	Nombre d'épreuves	Coefficient de l'épreuve	Note éliminatoire de l'épreuve	Remarques
Contrôle Continu Intégral	Compte-Rendu			1		

Seconde chance / Session de rattrapage - Épreuves

Type d'évaluation	Nature de l'épreuve	Durée (en minutes)	Nombre d'épreuves	Coefficient de l'épreuve	Note éliminatoire de l'épreuve	Remarques
Contrôle Continu Intégral	Compte-Rendu					

Infos pratiques



Contacts

Responsable UE

Cédric Crespos

✉ Cedric.Crespos@bordeaux-inp.fr