

5CI208 Modélisation des propriétés électroniques									
Méthodes Hartree-Fock et post-Hartree-Fock, Fonctionnelle de la densité et TD-DFT, Modélisation des propriétés électroniques et structurales pour systèmes moléculaires et périodiques									
Responsable Alexis MARKOVITS, Pr Laboratoire de Chimie Théorique. Sorbonne Université									
ECTS	Cours (h)	TD (h)	TP (h)	Tutorat (h)	Ecrit (%)	CC (%)	TP (%)	Oral (%)	Eval. répartie
6	12	24	12	Oui	60	40			non
<i>Descriptif de l'UE</i>									
<p>Cette UE fournit une description avancée de la structure électronique de la molécule et du solide, et de ses conséquences sur certaines propriétés (structure, énergie et spectroscopies). Des cours présentent les principes fondamentaux, des TD et TP permettent de comprendre l'implication de ces principes sur des exemples concrets. La mise en pratique des formalismes est abordée lors de séances en salle informatique à l'aide de codes les plus utilisés en recherche et application. L'étudiant voit en tutorat un sujet plus spécialisé pour une acquisition autonome adaptée à sa formation préalable. Cette UE s'adresse donc non seulement à toute personne souhaitant continuer dans un parcours en modélisation moléculaire, mais également à des expérimentateurs (chimie organique, inorganique, des surfaces, catalyse hétérogène, biologie, spectroscopie moderne : RMN, dichroïsme circulaire...) amenés à interagir avec des chimistes théoriciens.</p>									
<i>Objectifs d'apprentissage</i>									
<p>L'étudiant connaîtra les principales méthodes de la Chimie quantique de représentation des systèmes moléculaires et solides avec leurs domaines d'applications et leurs limites. Il saura quelle méthode choisir pour traiter un problème. Il pourra interpréter les résultats des simulations pour comprendre les phénomènes physico-chimiques courants..</p>									
<i>Prérequis</i>									
Approximation orbitalaire, théorie LCAO, symétrie des molécules et des orbitales atomiques, opérateurs, mécanique quantique élémentaire pour les systèmes simples									
Langue	Cours, TD, TP Français							Documents Français et Anglais	Bibliographie Français et Anglais

Fonctionnement de l'UE

Un tronc commun présentera en cours les méthodes les plus utilisées pour étudier la structure électronique des molécules et du solide.

1) Introduction à la structure électronique

- exemple d'applications visées
- approches orbitales simples (molécules, solides)
- panorama des méthodes de calculs (HF, DFT, post-HF, ...)

2) Méthodes de fonction d'onde

- HF
- post-HF (variation, perturbation coupled-cluster)
- analyse orbitalaire

3) Théorie de la fonctionnelle de la densité

4) Le solide et les surfaces

4) Etudes de propriétés

- propriétés moléculaires (par ex : polarisabilité)
- interprétation de la réactivité en Chimie organique
- spectroscopies
- interactions avec le solide, propriétés catalytiques
- états excités

Ces cours seront illustrés par des exemples lors de séances de travaux dirigés. De plus, lors de séances en salle informatique, l'étudiant manipulera des codes de calcul où les méthodes précédemment étudiées seront appliquées à quelques systèmes chimiques : structure électronique, optimisation de géométrie, recherche d'états de transition, prédiction de spectres infrarouge et RAMAN...

Le module se complétera par un projet sur un système physico-chimique concret exigeant éventuellement une méthode pointue ou un approfondissement d'une méthode traitée précédemment. L'étudiant réalisera ce projet par des calculs en salle informatique et par une recherche bibliographique. Il le soutiendra devant un jury.