

## Fiche de présentation Formation Thématique ECOLE DOCTORALE 3MPL

**Nom de la Formation Thématique :** La modélisation pour les expérimentateurs : structure et propriétés de la matière (1)

**Code :** 3MPL118

**Etablissement dont relève la formation :** Univ. Angers  / Univ. Maine  / Univ. Nantes  / EMN

**UFR ou Ecole organisatrice :** UFR Sciences et Techniques

**Localisation des enseignements :** Université de Nantes

**Capacité d'accueil :** 15

**Responsable :** Nom : Le Questel Prénom : Jean-Yves Courriel : Jean-Yves.Le-Questel@univ-nantes.fr

**Nombre de crédits ECTS :** 4

**Volume horaire pour l'étudiant :** 12h (2 jours)

**Visioconférence possible :** Oui  Non

**Compétences pré-requises :** notions de symétrie, de cristallographie, de réactivité chimique, de spectroscopies

**Compétences à acquérir par l'étudiant dans cette formation :** Avoir un regard critique sur la modélisation et son intérêt dans les domaines de la chimie et de la physique : Avantages et limites des techniques couramment utilisées pour décrire la réactivité chimique, les nanomatériaux et l'état solide / Quelle propriété peut être modélisée et avec quelle technique ?

**Modalités de validation de ces compétences :**  
Assiduité

### Résumé de la formation :

- Introduction à la modélisation : Intérêts, potentialités (propriétés, type de systèmes) ...
- Présentation des différentes approches : semi-empiriques, Hartree-Fock, post Hartree-Fock et DFT
- Intérêt des outils d'optimisation de géométrie et notions de dynamique moléculaire.
- Présentation de la démarche de modélisation de la réactivité chimique : paramètres cinétiques (constantes de vitesse, énergie d'activation...) et thermodynamiques / descripteurs théoriques (potentiel électrostatique...).
- Présentation de la démarche de modélisation des propriétés (électroniques, optiques, magnétiques ...) des molécules (solvatées ou non) et des solides.
- Bilan des données expérimentales pouvant être modélisées : structure atomique, liaison chimique, réactivité chimique, spectroscopies électroniques (EELS), optiques, vibrationnelles (IR-Raman), RPE, RMN, images MET, ...

### Informations complémentaires :

Cette formation s'adresse à des doctorants non-experts en modélisation. L'objectif est de les familiariser avec cette technique, qui au même titre que la RMN ou toute autre expérience, permet de caractériser plus finement la structure et les propriétés d'une molécule ou d'un matériau. La terminologie propre à ce domaine sera également définie afin d'aider le doctorant à mieux appréhender les communications (écrites ou orales) faisant appel à la modélisation.