

## Fiche de présentation Formation Thématique ECOLE DOCTORALE 3MPL

**Nom de la Formation Thématique :** La modélisation pour les expérimentateurs : structure et propriétés de la matière (2)

**Université dont relève la formation :** Université Angers    Université Maine    Université Nantes

**UFR ou Ecole organisatrice :** Science Nantes

**Localisation des enseignements :** IMN- 2 rue de la Houssinière-Nantes

**Capacité d'accueil :** 15

**Seuil d'ouverture :** 5

**Responsable :** Nom : Ewels    Prénom : Chris    Courriel : chris.ewels@cnsr-imn.fr

**Nombre de crédits ECTS :** 3

**Volume horaire pour l'étudiant :** 10h

**Coût en équivalents TD :**

**Horaire d'enseignement prévu :** - répartition des heures d'enseignement 2 fois 5 heures  
- visioconférence possible : Oui  
- A Institut des Matériaux Jean Rouxel à Nantes

**Compétences pré-requises :** Avoir suivi la formation théorique « La modélisation pour les expérimentateurs (1) »

**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 :**

- Modélisation sur ordinateur d'une molécule organique (orbitales frontières) et comparaison avec l'expérience.
- Modélisation sur ordinateur de la structure électronique d'un solide. Prédiction de quelques propriétés (électronique, optique, magnétique ...) et comparaison avec les données expérimentales.
- Recherche de la géométrie d'équilibre d'une molécule ou d'un solide à partir de l'outil « optimisation de géométrie ».

**Informations complémentaires :** Cet atelier s'adresse aux doctorants, ayant suivi la formation « La modélisation pour les expérimentateurs (1) », qui souhaitent approfondir leur apprentissage de la modélisation au travers de la pratique sur ordinateur.