

Public concerné :

Chercheurs, ingénieurs

Il est demandé de posséder quelques bases de physique quantique

Durée de la formation :

3 jours

3 à 5 jours

Responsable de la formation :

FRANCK RABILLOUD

Telephone : 0472432931

Email : franck.rabilloud@univ-lyon1.fr

Contact formation continue et alternance (FOCAL) :

AMANDINE GENIN

Email : amandine.genin@univ-lyon1.fr

Prochaine session :

A la demande

Objectifs de la formation :

Acquérir les connaissances théoriques et les techniques de chimie quantique pour modéliser une molécule ou un édifice atomique.
Mise en œuvre pratique des techniques de simulation avec l'utilisation de logiciels de chimie quantique

Programme :

Le programme indicatif suivant contient des cours théoriques et des travaux pratiques sur ordinateur.

Théorie

- Introduction générale, bases de la chimie quantique ab initio
- Hartree-Fock et méthodes corrélées
- Théorie de la fonctionnelle de la densité
- Méthodes semi-empiriques
- Calculs de propriétés physiques et chimiques

Travaux pratiques

- Utilisation de logiciels de chimie quantique
- Application à des molécules ou matériaux
- Simulations et calculs de propriétés physiques et chimiques
- Extraction des données et analyse des résultats

Conditions de validation :

Attestation de présence.

Lieu principal d'enseignement :

- Villeurbanne - La Doua

Tarifs :

Consulter le responsable pédagogique.