

## 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.