

# Approches computationnelles des états de la matière

## Titulaires

Nathalie VAECK (Coordonnateur), Antoine Aerts, Emilie CAUET et Martine PREVOST

## Mnémonique du cours

CHIM-F443

## Crédits ECTS

5 crédits

## Langue(s) d'enseignement

Français

## Période du cours

Premier quadrimestre

## Campus

Solbosch

## Contenu du cours

Chimie computationnelle: méthode Hartree-Fock (HF) ab initio, approches ab initio post-HF et "density functional theory (DFT)", mécanique moléculaire, dynamique moléculaire classique

## Objectifs (et/ou acquis d'apprentissages spécifiques)

Introduire les approches théoriques et informatiques qui permettent à un chimiste de modéliser les systèmes et les processus réactifs qu'il étudie (chimie numérique). Initiation à un logiciel open source.

## Pré-requis et co-requis

### Connaissances et compétences pré-requises

Aucune connaissance en programmation n'est nécessaire

## Méthodes d'enseignement et activités d'apprentissages

Cours basé des séances de travaux pratiques sur ordinateur.

Le premier cours d'introduction (local DC7 222) donnera toutes les informations nécessaires. Portail sur l'UV avec présentations PowerPoint et informations diverses permet aux étudiants de se familiariser avec la théorie. Séances de questions - réponses en début de chaque séance de travaux pratiques. L'essentiel de la théorie sera également passée en revue lors de ces séances.

## Contribution au profil d'enseignement

Introduire les aspects computationnels de la chimie et préparer à la lecture de la littérature associée. Permettre à tout chimiste d'effectuer des calculs moléculaires et d'en connaître les limitations.

## Références, bibliographie et lectures recommandées

Leach "Molecular modelling: principles and applications", Prentice Hall 2001. Brereton "Chemometrics: data analysis for the laboratory and the chemical plant", Wiley 2003.

## Support(s) de cours

Université virtuelle

## Autres renseignements

### Lieu(x) d'enseignement

Solbosch

### Contact(s)

Solbosh, Bâtiment D, local DC7-115 Tél: 02-6504728 E-mail: nathalie.vaeck@ulb.be

## Méthode(s) d'évaluation

Projet

### Méthode(s) d'évaluation (complément)

Evaluation du projet

### Construction de la note (en ce compris, la pondération des notes partielles)

Projet 100%

### Langue(s) d'évaluation principale(s)

Français

## Programmes

### Programmes proposant ce cours à la faculté des Sciences

MA-BINF | Master en bioinformatique et modélisation | finalité Approfondie/bloc 2, MA-CHIM | Master en sciences chimiques | finalité Approfondie/bloc 1, finalité Didactique/bloc 1, finalité Didactique/bloc 2 et finalité Spécialisée/bloc 1 et MA-

IRBC | Master : bioingénieur en chimie et bioindustries | finalité  
Spécialisée/bloc 2

## Programmes proposant ce cours à l'école polytechnique de Bruxelles

MA-IRBC | Master : bioingénieur en chimie et  
bioindustries | finalité Spécialisée/bloc 2 et MS-NATE | Master de  
spécialisation en nanotechnologie | bloc U

