

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

