

Simulation moléculaire



Composante
École Nationale
Supérieure des
Ingénieurs en
Arts Chimiques



Volume horaire
16h

En bref

- > **Code:** LP196V3P
- > **Ouvert aux étudiants en échange:** Oui

Présentation

Objectifs

Maîtriser les méthodes de la chimie théorique implémentées dans un code de calcul.
Application à la détermination de propriétés de molécules et à des problèmes chimiques réels.

Syllabus

- Maîtrise du logiciel SPARTAN
- Calcul numérique de la structure électronique des molécules (orbitales moléculaires)
- Approches Hartree-Fock, semi-empiriques.
- Réactivité
- Surfaces de potentiel, chemins réactionnels

Informations complémentaires

TD en salle informatique