

COMPRENDRE ET PRÉVOIR UNE RÉACTION CHIMIQUE. MODÉLISATION ET CHIMIOMÉTRIE

RÉSUMÉ DE LA FORMATION

Type de diplôme : Formation qualifiante

Domaine ministériel : Sciences, Technologies, Santé

Responsable

- Émilie-Laure Zaus

Thématique : Chimie

Public et prérequis

Ingénieur (chimiste, biologiste ...) souhaitant se former à la chimie quantique et/ou à la chimiométrie

Prérequis : Toute formation d'ingénieur, comprenant des connaissances en physique ou en chimie

Objectifs

Savoir utiliser des logiciels actuels appliqués à la chimie pour la modélisation moléculaire, les calculs énergétiques, le traitement statistique et l'interprétation des données.

Pouvoir identifier les différents isomères d'un complexe, et mettre en évidence les éventuelles différences qui seraient observées par des méthodes spectroscopiques (IR, micro-ondes ...).

Pouvoir proposer un chemin réactionnel et estimer la barrière énergétique associée à une réaction simple.

Contenu

Jour 1 :

Présentation des fondements conceptuels nécessaires aux calculs ab initio + DFT (Density Functional Theory) sur de petits systèmes moléculaires.

Application des calculs de mécanique quantique sur des systèmes simples avec le logiciel Gaussian09.

Jour 2 :

Présentation de méthodes simples pour la recherche de différents isomères correspondant à la formation d'un complexe non covalent entre deux partenaires.

Utilisation du logiciel Gaussian09 pour résoudre des problèmes complexes, tels que la recherche de chemins réactionnels, ou l'étude de réaction de catalyse organométallique en phase homogène.

Jour 3 :

Introduction aux traitements multivariés des données (chimiométrie) : classification ascendante hiérarchique, analyse en composantes principales, méthodes de calibration multivariées. Principes et exemples issus de spectroscopies.

Illustration d'une mise en œuvre avec utilisation d'un logiciel de chimiométrie (Statistica).

Effectif : 6 à 15

Tarifs

1500€

Organisation/Calendrier

Organisation

Trois jours consécutifs

Calendrier



Toutes les informations données sur cette page sont indicatives et n'ont pas de valeur contractuelle

Nous consulter

Durée : 21 heures

Contacts/Inscription

Inscription

Roselyne FRIEDENBERG

roselyne.friedenberg_remy@sorbonne-universite.fr

Audrey VIDAL

audrey.vidal@sorbonne-universite.fr

chimie-fc@sorbonne-universite.fr

Evaluation/Validation

Validation : Attestation de fin de formation