

Modélisation en chimie organique

Niveau d'étude
Bac +5

ECTS
3 crédits

Composante
**Sciences Fondamentales
et Appliquées**

Période de l'année
Semestre 9

Présentation

Description

Cette UE traite de la modélisation moléculaire appliquée à des problèmes de chimie organique, plus particulièrement de la prédiction et de la rationalisation de la réactivité et de la sélectivité. Une partie de cette UE est dédiée aux méthodes conceptuelles (calculs de descripteurs). Elle se déroulera sous la forme d'un projet de modélisation, mené par les étudiants en binômes, et sera évaluée par un rapport au format publication et une présentation orale.

Objectifs

- Elaborer une stratégie de modélisation moléculaire permettant de répondre à une problématique de recherche en réactivité organique
- Mettre en application de cette stratégie de modélisation (réaliser les calculs)
- Analyser et interpréter les résultats obtenus
- Restituer sous forme d'un rapport au format publication et d'une présentation

Heures d'enseignement

P-Proj

Pédagogie par projet

26h

Pré-requis obligatoires

licence chimie ou physique-chimie, UE chimie théorique de M1 ou équivalent

Programme détaillé

- introduction aux méthodes d'analyse de la structure électronique : calcul de charges atomiques (méthode de Hirshfeld, analyse de population naturelle), calcul d'orbitales moléculaires (DFT Kohn Sham)
- introduction à la DFT conceptuelle : calcul de descripteurs globaux (potentiel chimique, dureté de Pearson, indice d'électrophilie) et locaux (fonctions de Fukui, descripteur dual, mollesse locale), application de ces descripteurs à la rationalisation des propriétés chimiques.
- modélisation moléculaire par calculs DFT : choix des méthodes, choix des modèles, réalisation des calculs sur un ordinateur (cluster Yargla SFA/IC2MP), traitement des résultats (extraction des données des fichiers sorties, traitement assisté par interface graphique).
- modélisation de la réactivité : calculs de chemins réactionnels (états de transition, IRC)

Informations complémentaires

Les simulations numériques en chimie quantique (TP) sont basées sur des logiciels de recherche (IC2MP) et moyens informatiques (UFR SFA/UP et IC2MP) adaptés à un groupe de 16 étudiants au maximum (8 postes de travail fonctionnels avec licence pour le logiciel , salle Epicure, B7).

Compétences visées

- savoir construire une série de modèles moléculaires pour l'étude par simulation numérique en chimie quantique d'un problème de chimie expérimentale
- savoir adapter le niveau de théorie au problème étudié (compromis précision/ressources nécessaires)
- savoir varier les points de vue adoptés dans l'analyse des résultats (multiplicité des explications causales possibles)
- savoir restituer ses résultats au format attendu pour des travaux de recherche (publication scientifique, présentation en congrès)

Infos pratiques

Lieu(x)

Poitiers-Campus