

Modélisation et Chimiométrie

Responsable : Emilie-Laure Zins

Public et prérequis

Ingénieurs et Techniciens supérieurs chimistes.

Organisation

Durée et rythme de la formation :

30 heures sur 4 jours consécutifs.

(60 % d'application - 40% de cours)

Nombre de Participants : minimum 4 - maximum 12.

Objectifs

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

Calendrier

Mai 2015.

Validation

Attestation de stage et/ ou validation de l'UE NCMC du Master Chimie fondamentale et appliquée (M2) correspondant à 6 ECTS (sous conditions).

Contenus

Les fondements conceptuels nécessaires à la mécanique moléculaire et aux calculs *ab initio*, tels que les calculs de champs de force et la mécanique quantique, seront traités.

- Application de la modélisation moléculaire.
- Application de la mécanique quantique sur des systèmes simples avec le logiciel GAUSSIAN 09.
- Utilisation d'un logiciel de chimiométrie.

Tarif

1 280 €.

Mots-clés : chimie moléculaire, chimie physique, chimie théorique, spectrochimie, mécanismes réactionnels, biochimie, thermodynamique.

Contact Administratif

Pôle sciences - Audrey VIDAL – 01 44 27 82 82

email : formation.continue@upmc.fr

Accueil : campus Jussieu - tour 14 - couloir 14/24 – 5^è étage
4, place Jussieu - 75252 Paris cedex 05 - Métro Jussieu