



## LABEL DE CHIMIE THEORIQUE

Pôle IDF-Nord

Année 2014 -2015

**Coordinateurs : P. Reinhardt et I. Demachy**

<http://www.chimie-theorique.cnrs.fr/>

### 1. Description du label de chimie théorique

Le Label de Chimie Théorique est un "label" au sens courant du terme (une étiquette) ; il est attribué à la fin du M2 ou en cours de thèse par le Réseau Français de Chimie Théorique aux étudiants ayant suivi l'ensemble des cours et validé les enseignements.

Les cours proposés permettent à des étudiants chimistes, physiciens ou physico-chimistes d'aborder tous les aspects de la modélisation en chimie et de ses développements récents.

Cette formation interdisciplinaire est destinée à de futurs théoriciens ou à de futurs expérimentateurs dans les domaines variés de la chimie et de la physique où la compréhension des propriétés moléculaires intrinsèques et des interactions moléculaires joue un rôle majeur. Cela va des aspects fondamentaux de la structure électronique et de l'interaction rayonnement matière à des domaines d'interface comme la chimie des matériaux, la catalyse, l'imagerie en biologie...

Le Label Chimie Théorique constitue également une information et une garantie pour de futurs employeurs et ceux qui seront chargés de recruter de jeunes docteurs..

Le Réseau français de Chimie Théorique est une institution reconnue et financée par le CNRS sous la forme d'un GDR.

Les objectifs principaux sont de

- 1 – préparer et former un vivier d'étudiants au meilleur niveau (par l'intermédiaire du Label) et favoriser leur mobilité ;
- 2 – susciter et soutenir de nouvelles recherches ;
- 3 – appuyer l'impact de la Chimie théorique dans le monde académique et industriel.

Le label de Chimie Théorique est ouvert à tout étudiant de M2 ou inscrit en thèse dans une des universités de la région parisienne/Nord.

Il est inscrit dans la liste des cours reconnus par les écoles doctorales Sciences, Ingénierie et Environnement de l'Université Paris-Est, Chimie de l'Université Paris-Sud et est une UE des formations suivantes :

- M2 Sciences de la matière spécialité Physico-Chimie des Matériaux et Applications, Université Paris-Est Marne-la-Vallée
- M2 Chimie et Physico-Chimie : Des Molécules aux Bio-Systèmes spécialité physico-chimie : Concepts, Pratiques et Modélisation, Université Paris-Sud Orsay

## 2. Comment s'inscrire et obtenir le label de Chimie Théorique ?

Les cours du label sont ouverts aux étudiants de M2 et aux doctorants. Chaque étudiant désireux de suivre ces cours doit faire parvenir un CV et le sujet de stage ou de thèse aux coordinateurs aux adresses mail suivantes :

[Isabelle.Demachy@u-psud.fr](mailto:Isabelle.Demachy@u-psud.fr)

[Peter.Reinhardt@upmc.fr](mailto:Peter.Reinhardt@upmc.fr)

Il est indispensable d'avoir suivi dans le parcours L + M1 un certain nombre de cours préparatoires (mécanique quantique, liaison chimique, chimie physique) ; pour des étudiants en M2 de même il est souhaitable qu'un stage dans une équipe théorique soit envisagé.

Pour obtenir le diplôme du Label, une moyenne de 10 / 20 est exigé comme résultat des TP et des examens. Ce diplôme peut être présenté ensuite aux instances de M2 qui reconnaissent cet enseignement comme équivalent de ECTS.

## 3. Evaluations des modules spécifiques

Les évaluations seront basées sur la moyenne des compte-rendus de TP sur ordinateur (au nombre de 4) et sur deux examens de 2 heures, constitués de questions tirées au sort parmi une liste de questions fournies par les enseignants au début de leur séance.

La note finale sera  $N = 1/8 (TP1 + TP2 + TP3 + TP4) + 1/4 (Ex1 + Ex2)$

#### 4. Equipe pédagogique

Université Pierre et Marie Curie	P. Reinhardt, A. Markovits, N. Capron, S. Carniato, J. Contreras, J. Toulouse, B. Braïda
ENS Paris	A. Boutin, R. Vuilleumier
ChimieParisTech	C. Adamo, F.-X. Coudert
Université Paris-Est Marne-la-Vallée	C. Léonard, M. Hochlaf
Université d'Evry	M.-P. Gageot, R. Spezia
Université Paris-Sud Orsay	I. Demachy, P. Pernot, A. De La Lande, J. Roques, D. Lauvergnat
Université Lille 1	V. Vallet, S. Cristol, D. Pelaez-Ruiz
Institut de biologie Physico-chimique	F. Sterpone, S. Sacquin-Mora
Ecole Polytechnique	C. Clavaguéra
Collège de France	C. Mellot-Draznieks

#### 5. Lieux des enseignements

Les enseignements se dérouleront à Paris (Amphithéâtre Jean Perrin et Institut Henri Poincaré, 13 rue Pierre et Marie Curie, 75005 Paris), les travaux pratiques auront lieu à l'école de Chimie de Paris (ChimieParisTech), à la même adresse.

La première semaine est commune à tous, pour la 2<sup>e</sup> semaine un choix doit être fait au préalable entre deux parcours.

**Emploi du temps : du 19 au 30 janvier 2015**

**Matin : 9h30 – 12h30 ; Après-midi : 14h – 17h**

**Première semaine (4,5 jours + exam, dont 1 journée cours/TP)**

**Lundi, 19 janvier, amphi Jean Perrin**

Introduction aux méthodes de chimie théorique (R. Vuilleumier) quantiques / classiques / combinaisons QM/MM	3 h + 3 h
--	-----------

**Mardi, 20 janvier, amphi Jean Perrin**

Méthodes ab initio pour la structure électronique de molécules (S. Carniato)	3 h
Spectroscopie théorique (M. Hochlaf)	3 h

**Mercredi, 21 janvier, amphi Jean Perrin**

Exploration des SEP et états de transition (S. Cristol)	3 h
Théorie de la DFT (C. Adamo)	3 h

**Jeudi, 22 janvier, salles TP, ENSCP**

Simulation moléculaire : propriétés structurales, dynamiques, thermodynamique (F.X. Coudert, A. Boutin, I. Demachy)	6 h Cours/TP
--	--------------

**Vendredi, 23 janvier, amphi Jean Perrin**

Méthodes théoriques pour structures périodiques (N. Capron)	3h
14 – 16 h, Evaluation (choix de questions)	2 h

**Deuxième semaine : choix entre deux ensembles d'approfondissement (4,5 jours + exam, 3 séances de TP / ensemble)**

**Lundi, 26 janvier, TP l'après-midi, ENSCP**

<b>Choix A (amphi Jean Perrin)</b>	<b>Choix B (Institut Henri Poincaré, salle 05)</b>
Spectroscopie moléculaire (3h + 3h TP) C. Léonard, D. Lauvergnat, D. Pelaez-Ruiz	Modélisation par chimie quantique de l'interaction molécule-surface (3h + 3h TP) A. Markovits et J. Roques

**Mardi, 27 janvier, TP l'après-midi, ENSCP**

Monte-Carlo Quantique (3h) J. Toulouse	Dynamique moléculaire quantique et classique (3h + 3h TP) M.P. Gageot et A. De la Lande
Etat de l'art en DFT (3H TP) C. Adamo	

**Mercredi, 28 janvier, pas de TP**

Chimie quantique relativiste (3h) V. Vallet	Modélisation multiéchelle de matériaux et nanomatériaux (3h) C. Mellot-Draznieks
Réactivité et VB (3h cours) R. Spezia et B. Braïda (IHP salle 201)	Etat de l'art des champs de force (3h) C. Clavaguera

**Judi, 29 janvier, TP l'après-midi ENSCP**

Interactions intermoléculaires (3h) P. Reinhardt (IHP salle 201)	Modélisation multi échelle des processus biophysiques (3h) F. Sterpone, S. Sacquin-Mora
Interactions covalentes et non-covalentes : topologie et interprétation (3h cours-TP) J. Contreras	Modélisation d'états excités dans des nanosystèmes (3h TP) A. Perrier-Pineau

**Vendredi, 30 janvier, pas de TP**

Dynamique quantique, états excités (3h) C. Léonard, D. Lauvergnat, D. Pelaez-Ruiz	Incertitudes en modélisation physicochimiques : sources-solutions (3h) P. Pernot
14 – 16 h, Evaluation commune de 2 h (choix de questions), amphi Jean Perrin	