

**ECOLE THEMATIQUE DU CNRS DE
MODELISATION MOLECULAIRE DES PROPRIETES CHIMICO-PHYSIQUES
PAR DES METHODES DE CHIMIE QUANTIQUE**

Délégation du CNRS organisatrice : DR13
Conseiller formation en charge de l'école : Isabelle Chang

LIEU de la formation : Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Montpellier
du 13 juin 2011 à 13 heures 30 au 17 juin 2011 à midi.

INSCRIPTION : les candidats à la formation doivent :

- 1- compléter la demande de formation qui est accessible sur le site du CNRS (http://www.dgdr.cnrs.fr/mpr/pratique/RH/docs/PDF/F_RH_formation.pdf)
- 2- renvoyer la demande de formation **au plus tard le 15 mars 2011** à fp@dr13.cnrs.fr (04 67 61 35 41) qui est la formation permanente de la délégation CNRS de Montpellier.
- 3- Pour les agents CNRS uniquement, envoyer en plus une copie au service formation de la délégation d'origine de l'agent.

A noter : L'école sera limitée à 30 participants. Les candidats sélectionnés sur la base de la demande de formation complétée seront informés le 5 avril du résultat.

Comité d'organisation : Dorothee Berthomieu UMR 5253, Carlo Adamo UMR 7575, Ilaria Ciofini UMR 7575. (Pour plus d'informations vous pouvez contacter dorothee.berthomieu@enscm.fr et 04 67 16 34 73)

PRESENTATION DE L'ECOLE : Aujourd'hui on s'attache à déterminer les fondements de plus en plus de différents phénomènes chimiques grâce aux outils de la chimie théorique. Les récents développements informatiques (logiciels et matériels) ont permis de complexifier les modèles théoriques, ce qui a participé à la promotion de l'approche théorique auprès de la communauté des chimistes et aussi des biologistes et physiciens. La chimie théorique permet d'accéder et de déterminer les propriétés physico-chimiques d'un système, grâce à un modèle théorique (et chimique) et d'en prédire le comportement.

Cette école thématique a au moins deux objectifs : a) permettre à ceux qui souhaitent effectuer des recherches avec une approche de modélisation d'en acquérir les bases, d'apprendre les enjeux de la modélisation moléculaire et savoir comment la mettre en œuvre b) faire comprendre aux expérimentateurs qui collaborent avec des modélisateurs quelles sont les problématiques liées aux différentes approches de la modélisation et ce qu'ils peuvent en attendre. Cette école a aussi pour vocation de faciliter les échanges entre des communautés d'expérimentateurs et de celles de modélisateurs pour parfaire leurs collaborations.

Cette école thématique comprendra de nombreux travaux pratiques. Le volet théorique se limitera à un cours de « rappel » d'une ½ journée. Le premier volet pratique introduira les bases pour une utilisation « minimale » d'un programme de chimie quantique[†]. Le deuxième volet de la formation sera constitué de Travaux sur projets.

FRAIS D'INSCRIPTION : les frais d'inscription à l'école thématique comprennent les coûts pédagogiques, les 4 déjeuners (mardi à vendredi) ainsi qu'un repas du soir.

Organismes privés : 1000 €

Personnels CNRS et académiques : pris en charge par le service formation du CNRS de Montpellier

Des chambres seront réservées pour les participants dans un même établissement au centre de Montpellier. Les hébergements seront pris en charge pour les personnels CNRS et sous réserve des résultats de l'appel d'offre ils le seront pour les académiques.

GRANDS AXES DU PROGRAMME :

- IR, Raman
- UV-Vis, ONL (optique non-linéaire)
- RMN
- RPE
- Réactivité
- Modélisation des effets de l'environnement (QM/MM, solvant) sur les propriétés moléculaires

INTERVENANTS : Huit intervenants spécialistes du domaine participeront à la formation dont cinq intervenants qui seront présents en permanence.

PARTICIPANTS :

Cette formation s'adresse à des expérimentateurs, permanents des laboratoires (chercheurs, enseignants-chercheurs, ingénieurs) et des chercheurs débutants (post-doctorants et doctorants) qui souhaitent acquérir une connaissance de base dans la modélisation et dans l'utilisation d'un code de calcul quantique.

PRE-REQUIS :

- Posséder des connaissances de chimie quantique et de chimie physique. Pour homogénéiser le niveau des participants, des cours (chimie quantique, modélisation moléculaire) seront distribués quelques semaines avant le début de la formation sous forme électronique (fichiers pdf). Des rappels de théorie sont aussi prévus au cours de la formation.