ENSMAC

# Chimie Physique & Approches Numériques

École / Prépa
ENSMAC

ECTS
3 crédits

## Présentation

**Code interne :** PC7CHPAN

## Description

Ce module permet d'approfondir les connaissances et compétences en matière de « Chimie Physique » par une approche fondamentale associée à la notion de modélisation à l'échelle atomique et moléculaire. Une partie importante de cet enseignement sera orientée vers la simulation numérique des équations fondamentales de la thermodynamique statistique et de la dynamique moléculaire.
Ce module sera utile aux étudiants qui souhaitent devenir ingénieur en Recherche et Développement et qui s'orientent particulièrement dans le développement d'outils de modélisation et de simulation des propriétés physico-chimiques de la matière.
A l'issue de ce cours les étudiants doivent :
- Savoir décrire et calculer les fonctions d'état et grandeurs macroscopiques de la thermodynamique (enthalpie, entropie, capacités calorifiques, etc... ) à partir d'une analyse microphysique.
- Savoir décrire les propriétés dynamiques d'un système moléculaire (évolution temporelle d'un système chimique, établissement d'un état d'équilibre, propriétés structurales, coefficients de diffusion, etc... ) à partir de la définition de champs de forces ou potentiels d'interactions intra et intermoléculaires.
- Développer un code de simulation numérique pour le calcul des propriétés physiques (propriétés statiques et propriétés dynamiques) d'un système moléculaire.
- Mettre en œuvre une démarche de modélisation et de calcul scientifique par la programmation.

## Heures d'enseignement

| | | |
|---|---|---|
| CI | Cours Intégrés | 36h |
| TDM | Travaux Dirigés sur Machine | 12h |

## Pré-requis obligatoires

Cours de Thermodynamique, Chimie Quantique, Programmation et Analyse Numérique de première année.

# Syllabus

Partie I : Thermodynamique Statistique : 22,66 H 17 créneaux de CM + TD (Fréderic Nallet)
Généralités / Présentation de la Thermodynamique Statistique
Distributions canonique et apparentées
L'indiscernabilité (fermions, bosons, limite classique)
Systèmes sans interaction (distributions statistiques, gaz parfait, gaz de fermi, corps noir)
Partie II: Dynamique Moléculaire : 13,33 H 10 créneaux de CM + TD (Cédric Crespos)
Généralités sur la dynamique moléculaire (DM) et les simulations numériques
Champs de forces et potentiels moléculaires
échantillonnage et conditions initiales
Mise en œuvre d'un algorithme type DM
Propriétés issues de la DM : énergie, fonctions de distribution, coefficient de diffusion, spectres...
Partie III : Modélisation et simulations numériques : 12 H CM + TD machines (Jean Toutain)
Développement d'outils numériques de type « Dynamique Moléculaire » pour le calcul de propriétés physico-chimiques.

# Bibliographie

Références Conseillées
COULON et S. MOREAU, « Physique Statistique et Thermodynamique » (Dunod)
REIF, « Physique Statistique - Cours de l'Université de Berkeley » (Armand Colin)
COHEN-TANNOUDJI, « Mecanique Quantique - Tomes 1et2 » (CNRS Editions)
W. ATKINS and R.S. FRIEDMAN « Molecular Quantum Mechanics » (Oxford University Press)
I.N. LEVINE, « Quantum Chemistry » (Prentice Hall

# Modalités de contrôle des connaissances

## Évaluation initiale / Session principale - Épreuves

| Type d'évaluation | Nature de l'épreuve | Durée (en minutes) | Nombre d'épreuves | Coefficient de l'épreuve | Note éliminatoire de l'épreuve | Remarques |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Contrôle Terminal | Ecrit | 120 | | 0.75 | | sans document |
| Contrôle Continu | Compte-Rendu | | | 0.25 | | |

## Seconde chance / Session de rattrapage - Épreuves

| Type d'évaluation | Nature de l'épreuve | Durée (en minutes) | Nombre d'épreuves | Coefficient de l'épreuve | Note éliminatoire de l'épreuve | Remarques |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Epreuve terminale | Ecrit | 120 | | 1 | | |

# Infos pratiques

## Contacts

Cédric Crespos
Cedric.Crespos@bordeaux-inp.fr