

CHIMIE - CHIMIE ANALYTIQUE, PHYSIQUE ET THÉORIQUE

# Comprendre et prévoir une réaction chimique. Modélisation et chimiométrie.

Cette formation permettra à des chimistes principalement expérimentateurs d'acquérir les bases nécessaires à la réalisation de calculs d'optimisations de géométrie. Les applications porteront notamment sur la modélisation de données expérimentales telles que des spectres de vibration (spectroscopies IR et Raman), des moments dipolaires et des constantes rotationnelles (spectroscopie micro-ondes). Des complexes non covalents et des réactions en catalyse homogène impliquant des complexes organométalliques serviront d'exemples pour les séances de travaux pratiques.

Un second volet de la formation sera dédié à la chimiométrie : différentes méthodes de retraitements statistiques et d'exploitations de données expérimentales seront présentées.

## PUBLIC ET PRÉ-REQUIS

Ingénieur (chimiste, biologiste ...) souhaitant se former à la chimie quantique et/ou à la chimiométrie.

### ET PRÉ-REQUIS

Toute formation d'ingénieur, comprenant des connaissances en physique ou en chimie.

## PROGRAMME

- **Jour 1 :** Présentation des fondements conceptuels nécessaires aux calculs ab initio et DFT (Density Functional Theory) sur de petits systèmes moléculaires.

Application des calculs de mécanique quantique sur des systèmes simples avec le logiciel Gaussian09.

- **Jour 2 :** Présentation de méthodes simples pour la recherche de différents isomères correspondant à la formation d'un complexe non covalent entre deux partenaires.

Utilisation du logiciel Gaussian09 pour résoudre des problèmes complexes, tels que la recherche de chemins réactionnels, ou l'étude de réaction de catalyse organométallique en phase homogène.

- **Jour 3 :** Introduction aux traitements multivariés des données (chimiométrie) : classification ascendante hiérarchique, analyse en composantes principales, méthodes de calibration multivariées. Principes et exemples issus de spectroscopies.

Illustration d'une mise en œuvre avec utilisation d'un logiciel de chimiométrie (Statistica).

## OBJECTIFS & COMPÉTENCES

- Savoir utiliser des logiciels actuels appliqués à la chimie pour la modélisation moléculaire, les calculs énergétiques, le traitement statistique et l'interprétation des données.
- Pouvoir identifier les différents isomères d'un complexe, et mettre en évidence les éventuelles différences qui seraient observées par des méthodes spectroscopiques (IR, micro-ondes ...).
- Pouvoir proposer un chemin réactionnel et estimer la barrière énergétique associée à une réaction simple.

### Informations clés

**🕒 Durée :**  
21 heures

**€ Tarif :**  
1500 €

### 📄 Informations

**Catégorie de l'action de développement des compétences :**  
(Article L6313-1 du Code du Travail)

Action de formation

**Effectifs :** Min 6 pers. / Max 15 pers.

**Documents :** Supports de cours.

**Évaluation et validation :**

Attestation de fin de formation

**Possibilité de sessions sur-mesure**

### Responsable(s)



**Emilie-Laure Zins**

### Contact

chimie-fc@sorbonne-  
universite.fr

## LES + DE LA FORMATION

---

- Modélisation de réactions chimiques appliquées à des réactions catalytiques pour la chimie verte.
- Présentation des derniers développements théoriques de pointe (notamment DFT-D).

## MÉTHODES PÉDAGOGIQUES

---

### Méthodes

La formation comprend des cours et des séances de travaux pratiques.

## ET APRÈS ?

---

Cette formation permet aux individus de sécuriser leur parcours professionnel en leur donnant les compétences nécessaires pour accompagner les entreprises dans les enjeux liés à leur secteur d'activité et s'adapter aux évolutions technologiques associées.

## POUR CANDIDATER

---

Inscription via formulaire (voir site web).