



## AMÉLIORER SON APPROCHE EXPÉRIMENTALE GRÂCE À L'OUTIL NUMÉRIQUE : PRINCIPES DE MODÉLISATION MOLÉCULAIRE APPLIQUÉS À L'OPTIMISATION DE PROTOCOLES EN SYNTHÈSE ORGANIQUE ET ORGANOMÉTALLIQUE

Les chercheurs ou ingénieurs amenés à optimiser des protocoles de synthèse (augmentation de la chimio-, régio- et/ou stéréo-sélectivité) vont acquérir, d'un point de vue théorique et pratique, les outils d'analyse et de prédiction de la réactivité chimique nécessaires à leur amélioration rationnelle (design *in silico*).

Ce stage est composé de deux modules, Principes et Applications, qui peuvent être suivis indépendamment dans la mesure où les pré-requis sont remplis. Le module 2 (Applications) donne la possibilité au stagiaire de définir son projet avec les intervenants, en fonction de ses intérêts.

🕒 **Durée de la formation** : 21 heures et 14 heures

📅 **Dates** : Voir le calendrier

€ **Tarif** : Voir ci-dessous

Module 1 : 1700€

Module 2 : 1200€

### OBJECTIFS ET COMPÉTENCES VISÉES

#### • **Module 1 : Principes**

Démystifier et maîtriser les outils de modélisation moléculaire.

Acquérir les bases nécessaires à un dialogue constructif expérimentateur – théoricien.

Analyser et interpréter de façon critique les résultats de calculs (les siens, ceux de collaborateurs, ceux de la littérature)

#### • **Module 2 : Applications**

Réaliser soi-même une étude complète de sélectivité sur un processus synthétique (construction du modèle, réalisation de l'étude, interprétation, design d'un processus amélioré).

### PUBLIC VISÉ

Ingénieur et chercheurs intéressés par une conception rationnelle de leurs procédés de synthèse (chimie moléculaire et catalyse homogène) par des méthodes de modélisation moléculaire.

### PRÉ-REQUIS

**Module 1** : Niveau Ingénieur chimiste ou Master Chime (tous cursus). Aucune compétence particulière en programmation n'est requise.

**Module 2** : bases de modélisation moléculaire : méthodes et interprétation.

### PROGRAMME

#### • **Module 1 – Principes : Acquisition des bases fondamentales**

### INFORMATIONS

#### **Catégorie de l'action de développement des compétences :**

(Article L6313-1 du Code du Travail)

Action de formation

#### **Effectifs :**

Module 1 : Min 2 pers. / Max 8 pers.

Module 2 : Nombre de places en fonction des sujets, nous consulter.

**Documents** : Supports de cours.

#### **Évaluation et validation :**

Attestation de fin de formation

**Possibilité de sessions sur-mesure**

### CONTACT

📞 01 44 27 82 82

✉ chimie-fc@sorbonne-universite.fr

J1 : Principes et champs d'application des différentes méthodes de modélisation moléculaire

TP : prise en main du logiciel de modélisation

J2 : Modélisation d'une réaction chimique

TP : étude d'une réaction en une étape (SN)

J3 : Modélisation du milieu réactionnel : questionnement et approches disponibles

TP : modélisations du solvant

• **Module 2 – Applications : Mener sa propre étude de design in silico (réalisé en mode projet, défini en amont avec les intervenants en fonction des intérêts du stagiaire) :**

J1 : Construire et Confirmer son modèle réactionnel

TP : Construction du modèle, validation de méthode, préparation de l'étude.

J2 : Interprétation des résultats : possibilités et limites

TP : Analyse des calculs préparés la veille, interprétation des résultats, mise en perspective des données expérimentales.

---

## MÉTHODES

Cours-TD, TP et projet personnel

---

## DEBOUCHES :

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.

---

## LES + DE LA FORMATION

- Forte composante pratique.
  - La formation se découpe en deux modules : Principes et Applications.
  - Il est conseillé de les suivre successivement mais ils peuvent être suivis chacun de façon séparée.
  - Le module 2, propose de réaliser en deux jours un projet personnel qui peut être défini en fonction des intérêts du stagiaire.
  - Formation dispensée dans un laboratoire spécialisé en chimie théorique, bénéficiant d'une expertise reconnue dans le domaine de la modélisation pour la chimie de synthèse. Laboratoire unique en France.
  - Calculs réalisés sur une plateforme de calculs de niveau recherche.
- 
-