Domaine : Chimie - Thématique(s) : Chimie analytique, physique et théorique STAGES COURTS

## 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.

① Durée de la formation : 21 heures et 14 heures

☐ Dates : Voir le calendrier ② Lieu : Laboratoire de Chimie Théorique, Campus Pierre et Marie Curie,

Paris

€ Tarif: Voir ci-dessous

Module 1: 1700€ Module 2 : 1200€

## **OBJECTIFS ET COMPÉTENCES VISÉES**

## • Module 1: Principes

Démystifier et maitriser 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.

#### **INFORMATIONS**

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

(Article L6313-1 du Code du Travail) Action de formation

#### Effectifs:

Modalité: Présentiel

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

**D** 01 44 27 82 82 ☑ chimie-fc@sorbonne-universite.fr





#### **PROGRAMME**

#### • Module 1 - Principes: Acquisition des bases fondamentales

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 intérets 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.

