

Participation :

Pour des raisons d'efficacité, un maximum de quarante (40) participants pourront profiter de la formation. Ils seront sélectionnés par le comité d'organisation selon leurs fiches de présentation (téléchargeable sur le site de l'université de Tlemcen).

Contenu de la formation :

Méthodes ab initio standard («post-HF»), DFT, spectroscopie théorique, systèmes complexes et dynamique moléculaire.

Dates :

Dates de l'école: du 26 au 29 mai 2016

Date limite d'inscription: le 30 Avril 2016

Public visé:

- Post-Doctorants et Enseignants-Chercheurs (perfectionnement)
- Doctorants en Sciences et LMD (formation)
- Master 2 (initiation)

Frais d'inscription :

10000 Da pour les enseignants

7000 Da pour les doctorants

5000 Da pour les étudiants en master

Ces frais couvrent la documentation scientifique, les repas, les pause-café.

L'hôtel est à la charge des participants.

Lieu de la formation :

Université de Tlemcen – Salle des conférences de la faculté des Sciences

Contenu de la formation:

Cours: 16h

- Théorèmes fondamentaux de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), introduction à la DFT dépendante du temps (TD-DFT), applications.
- Ab initio spectroscopy, méthodes de calculs électroniques explicitement corrélées
- Chimie structurale théorique.
- Méthode du champ de réaction et simulation moléculaire

Ateliers: 12h

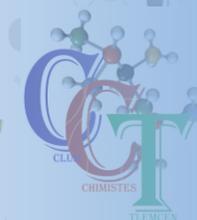
- Calcul de spectres rotationnels, de vibrations-rotations et électroniques des systèmes moléculaires rigides et van der Waals
- Application de la DFT dans l'étude de propriétés physicochimiques de complexes de métaux lourds- pratique du code ADF, effets relativistes- structure électronique, propriétés redox, Couplage Ferro & antiferro-magnétique
- Méthode du champ de réaction et simulation moléculaire
- chimie structurale théorique, interprétation orbitale qualitative de la stabilité chimique.

Ministère de l'Enseignement Supérieur
et de la recherche Scientifique

Université Abou Bekr Belkaid de
Tlemcen

en collaboration avec :

le club des chimistes de Tlemcen
et le
Réseau des chimistes théoriciens
algériens



Organisent :

L'Ecole de printemps

Simulations Quantiques et
Applications

SQA 2016

du 26 au 29 mai 2016

Contact: ecole.printemps.2016@gmail.com

L'école "Simulations Quantiques et Applications « SQA2016»" permettra de dispenser aux participants des cours et des travaux pratiques sur les méthodes quantochimiques usuelles et/ou codes de calculs associés aux propriétés fondamentales ou spectroscopiques de molécules isolées, en solution ou dans un environnement complexe.

Les méthodes avancées de calcul de la structure électronique sont devenues un outil pratique et indispensable, et cette école permettra d'acquérir une expérience dans leurs utilisations.

Quelques méthodes (post-HF, DFT, dynamique moléculaire...) ainsi que leurs applications seront présentées. Pour chaque sujet, une conférence introductive sera présentée, elle sera suivie d'exercices pratiques sur ordinateur en utilisant les codes Gaussian, Molpro, ADF et ORCA.

Une connaissance basique (pré-requis) en mécanique quantique et chimie quantique est nécessaire.

Il est demandé aux participants de maîtriser l'utilisation de l'environnement Linux. Chaque participant doit être muni de son ordinateur portable (avec une version de Linux installée dessus).

Suivant les processus et les systèmes étudiés, les participants devront être capables à l'issue de la formation, de choisir la méthode la plus appropriée à un système donné, ou d'amorcer des collaborations scientifiques dans le cas où cette mise en œuvre s'avère plus complexe.

Des séances poster permettront aux doctorants et post-doctorants de communiquer leurs travaux récents.

Cette école se déroulera en collaboration avec le club des chimistes de Tlemcen et le Réseau des Chimistes Théoriciens Algériens (RCTA) pour renforcer son ouverture à l'international ainsi que l'impact de la chimie théorique dans les champs académique et industriel.

Comité d'organisation

Dr. Azizi Sihem (Université de Tlemcen)
Pr. Belkhiri Lotfi (Université de Constantine)
Pr. Mekelleche Sidi Mohamed (Université de Tlemcen)
Pr. Choukchou-Braham Nour Eddine (Université de Tlemcen)
Pr. Boucli-Hacène Lila (Université de Tlemcen)
Dr. Kazi-Aouel Amina (Université de Tlemcen)
Dr. Dergal Fayçal (C.R.A.P.C)
Dr. Benchouk Wafaa (Université de Tlemcen)

Comité scientifique

Pr. Boucekkine Abdou (Université de Rennes)
Dr. Azizi Sihem (Université de Tlemcen)
Pr. Belkhiri Lotfi (Université de Constantine)
Pr. Hochlaf Majdi (Université de Marne la Vallée Paris)
Pr. Levy Bernard (Université Paris Sud)
Pr. Mekelleche Sidi Mohamed (Université de Tlemcen)
Pr. Saillard Jean-Yves (Université de Rennes)

Formateurs :

Pr. Boucekkine Abdou (Université de Rennes)
Pr. Hochlaf Majdi (Université de Marne La Vallée Paris)
Pr Saillard Jean-Yves (Université de Rennes)
Pr Levy Bernard (Université Paris Sud)
Pr. Belkhiri Lotfi (Université de Constantine)
Pr. Mekelleche Sid Ahmed (Université de Tlemcen)
Dr. Azizi Sihem (Université de Tlemcen)