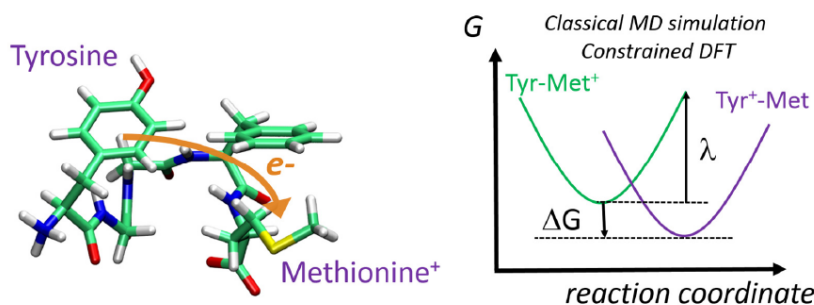


Projet deMon

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est à l'heure actuelle une des méthodes de chimie théorique les plus utilisées. Elle permet de calculer de nombreuses observables pour des systèmes moléculaires de grande taille à un coup raisonnable. L'objet de ce workshop d'une semaine était de présenter les fondamentaux de la DFT au travers du programme deMon-2k, dont un pôle de développement est située au Laboratoire de Chimie Physique d'Orsay.

Formation et établissements concernés : [Ecole Doctorale 2MIB, Université Paris-Saclay](#), [Ecole Doctorale Ondes et Matière, Université Paris-Saclay](#), Doctorants et post-doctorants.

Le workshop « deMon-2k et deMon-nano tutorial » s'est déroulé du 15 au 20 Juin 2015 sur le plateau de Saclay, dans les locaux de l'IDRIS. Il a réuni une trentaine de participants, principalement des doctorants et des post-doctorants, provenant des laboratoires de l'environnement Paris-Saclay, mais également d'autres universités de plusieurs pays (Belgique, Inde, Algérie, Russie,...). L'objectif du workshop était de présenter les fondements de la DFT et son utilisation pour le calcul de propriétés telles que des spectres électroniques, vibrationnels, des propriétés magnétiques (RMN, RPE),... Le programme consistait donc en sessions de cours donnés en anglais par des chercheurs internationaux et des sessions de travaux pratiques d'application utilisant le programme deMon-2k. Les étudiants avaient également comme objectif durant la semaine de résoudre, par petits groupes, un problème scientifique à l'aide de calculs de DFT. La matinée du dernier jour a été l'occasion d'une restitution de leurs résultats devant l'ensemble des participants. Il est important de noter que ce tutoriel n'était pas à destination unique des théoriciens, mais s'adressait également à des expérimentateurs.



Exemple de projet scientifique réalisé par les étudiants au cours du tutoriel. A l'aide de calcul de DFT sur des structures issues d'une simulation de dynamique moléculaire pour un petit peptide (à gauche), l'objectif était de déterminer la vitesse de transfert d'électron entre la tyrosine et la méthionine, dans le cadre de la théorie de Marcus (à droite).

Le retour des étudiants sur la semaine a été très positif. Les cours ont été très appréciés, et le format mêlant intimement théorie et application a été plébiscité. En dépit de la charge importante de travail due à ce format condensé d'une semaine, les étudiants se sont pris au jeu du projet scientifique. Dans l'ensemble les encadrants ont été très satisfaits de voir que la plupart des étudiants a été en mesure de réinvestir les notions apprises au cours de la semaine.

Références ou liens éventuels : L'ensemble des cours donnés pendant cette semaine est disponible sur le [site du workshop](#), hébergé par le CECAM

Résultats obtenus dans le cadre du projet deMon financé par le thème Formation-Diffusion du LabEx PALM et porté par **Fabien Cailliez et Aurélien de la Lande, respectivement MCF et CR CNRS au Laboratoire de Chimie Physique d'Orsay, Université Paris-Sud.**