

Atelier de simulations moléculaires

Une formation portant sur l'utilisation d'outils de simulations moléculaires aura lieu sur la plate forme de modélisation moléculaire multiéchelle

le Mardi 25 Septembre 2012, 8H00-12H00 ; 14H00-18H00

La formation est gratuite pour les personnels et étudiants (master et plus) de l'URCA et de l'UPJV.

La plate forme de modélisation est située sur le campus Moulin de la Housse, bâtiment 18 salle HII 15.

Objectif : Initiation à l'utilisation d'outils de simulations moléculaires : passage des systèmes simples aux systèmes plus complexes.

Public concerné : tout utilisateur débutant possédant des notions de base d'utilisation de *linux* et d'outils de visualisation.

Assistance maximale : 12 personnes.

Le programme est le suivant :

Outils quantiques

- Détermination de la structure géométrique et énergétique (Gaussian09).
- Visualisation des modes de vibrations (Molden).
- Calcul des charges et caractérisation de la liaison chimique.

Outils de dynamique classique

- Mise en place d'une simulation de dynamique moléculaire avec le logiciel GROMACS : préparation d'un système solvaté, minimisation en énergie, équilibration, production et analyse de la trajectoire.

Pour tout renseignement et inscription, veuillez écrire à : p3m@univ-reims.fr

Compte tenu du nombre de places limité pour cette formation, les inscriptions seront effectuées par ordre d'arrivée et **au plus tard le 21 Septembre 2012.**