



Fehmi KHADRI

Maître de Conférences
à la Faculté des Sciences de Tunis

FORMATION CERTIFIANTE

PROGRAMME



Local de la Société
Chimique de Tunisie

(Faculté des Sciences de Tunis)



02-04 juin 2026

INSCRIPTION

150 DINARS

Réservée aux adhérents
à la SCT (Adhésion : **20** DT)

PAIEMENT PAR:



Chèque



Bon de Commande



Virement Bancaire



20 PLACES SEULEMENT!
(1^{er} inscrit 1^{er} accepté)



J1 PRISE EN MAIN, BASES THÉORIQUES ET ÉNERGIE

Matin (08h30 - 11h45) : Fondamentaux et Environnement

- Introduction (Schrödinger, DFT, B3LYP, Bases def2).
- L'environnement de calcul (Commandes de base, structure d'un input).
- Collation déjeuner

Après-midi (13h00 - 15h45) : TP - Construction et SinglePoint.

- Construction de la molécule d'eau (H₂O) sur Avogadro.
- Calculs "Single Point" (Énergie d'un point fixe). Lecture du fichier output.

J2 THERMOCHEMIE, SOLVATATION ET PROPRIÉTÉS

Matin (08h30 - 11h45) : Optimisation et Fréquences

- Algorithmes d'optimisation. Calculs de fréquences vibrationnelles.
- Extraction de la thermochemie (ZPE, Enthalpie H, Énergie Libre G).
- Collation déjeuner

Après-midi (13h00 - 15h45) : TP - Cas Concrets

- Optimisation géométrique de l'Ammoniac (NH₃).
- Relancer un calcul avec un modèle de solvation implicite (GPCM).

J3 RÉACTIVITÉ ET ÉTATS DE TRANSITION

Matin (08h30 - 11h45) : Modélisation des Mécanismes

- Théorie de l'état de transition (TS). Fréquence imaginaire.
- Validation avec le calcul IRC.
- Collation déjeuner

Après-midi (13h00 - 15h45) : TP - Le Profil Énergétique

- Recherche du TS pour la réaction SN2 (F⁻ + CH₃Cl).
- Visualisation de la fréquence imaginaire et diagramme énergétique.
- Dépannage et questions.

Société Chimique de Tunisie (Tunisian Chemical Society)

Banque : Banque de Tunisie

Numéro de compte RIB : 0500 3000 0073 0352 1009

<https://forms.gle/CVzdtidBxN6PhAQy5>