

## Atelier Formation Calculs *ab initio* / RMN – semaine 48 – 26 au 30 Novembre 2007

Lundi	Mardi	Mercredi	Jeudi	Vendredi
8h45 Accueil des participants	8h30-10h00 : <b>L. Truflandier</b> Calcul du déplacement chimique Approche Moléculaire	8h45 : Questions ouvertes	8h45 : Questions ouvertes	8h45 : Questions ouvertes
9h00-10h30 <b>Ari P Seitsonen</b> Théorie DFT Principe d'un cycle SCF Fonctions de Bloch Onde Plane/Pseudopotentiel OP/PP	Opérateur densité de courant Composantes diamagnétiques et paramagnétiques Problème d'invariance de jauge	9h00-10h00 <b>Ari P Seitsonen</b> Calcul des forces et du stress par méthode OP Algorithmes d'optimisation de géométrie	9h00-10h30 <b>F. Boucher</b> Calcul DFT périodique avec une base tous électrons Présentation de la méthode FLAPW et du code WIEN2K	9h00-10h30 Présentation de projets
	10h00-10h30 Pause Café	10h00-10h30 Pause Café		
10h30-11h00 Pause Café	10h30-12h30 <b>Applications</b> <b>Prise en main du code Gaussian</b> deux exemples :	10h30-12h30 <b>T. Charpentier/C. Gervais/L. Truflandier ?</b> Exemple d'applications de la méthode GIPAW	10h30-11h00 Pause Café	10h30-11h00 Pause Café
11h00-12h30 <b>Ari P Seitsonen</b> Suite sur les notions de bases et critères de convergences	- approche moléculaire d'un acide aminé - approche cluster d'un système périodique		11h00-12h30 <b>L. Le Polles</b> Exemple d'applications de la méthode GIPAW - difficultés - précision	11h00-12h30 Présentation de projets
12h30 Repas (RU Lombarderie)	12h30 Repas (RU Lombarderie)	12h30 Repas (RU Lombarderie)	12h30 Repas (RU Lombarderie)	12h30 Repas (RU Lombarderie)
14h00-16h00 Application : <b>Calcul DFT en base OP/PP (Code PWSCF)</b> - SCF électronique - Convergence des points k - Convergence de la base - Notions de densité d'état - Notions de liaison chimique	14h00-16h00 <b>F. Mauri</b> Présentation de PAW et calcul du EFG Déplacement chimique en approche périodique : Présentation de la méthode GIPAW (implémentations, codes, road map)	14h00-16h00 Application : <b>Calcul du CSA par méthode GIPAW (Code PWSCF)</b> - sensibilité des paramètres RMN en fonction de la structure	14h00-16h00 Application : <b>Prise en main de Wien2K</b> (structure optimisée) - calcul de DOS - calcul EFG - comparaison avec onde plane	Possibilité d'exposés du type Réseau RMN GBP Autour du Calcul et de la RMN
16h00-16h30 Pause Café	16h00-16h30 Pause Café	16h00-16h30 Pause Café	16h00-16h30 Pause Café	16h00-16h30 Pause Café
16h30-18h30 Suite du TP onde Plane SCF électronique	16h30-18h00 Suite du TP sur Gaussian	16h30-18h30 <b>Optimisation de géométrie (Code PWSCF)</b> - analyse des forces - comparaison des optimisations avec expérience - comparaison entre EFG calculés et expérimentaux	Fin de l'après midi-libre ou perfectionnement TP	
	18h00 Pot d'accueil			
18h30 Fin		18h30 Fin	18h30 Fin	

