

Quantum modeling of materials and interfaces/Modélisation en chimie quantique de matériaux et interfaces

Niveau d'étude
Bac +5

ECTS
3 crédits

Composante
**Sciences Fondamentales
et Appliquées**

Période de l'année
Semestre 9

En bref

- # **Langue(s) d'enseignement:** Anglais
- # **Ouvert aux étudiants en échange:** Oui

Présentation

Description

The course will be delivered in English.

The aim of this course consists in

- Knowledge of materials for catalysis and energy
- Description of structural and electronic properties by band theory and orbital concepts
- Understanding of the binding mode and the chemical activation of adsorbed molecules according to the orientation of the crystalline surface
- Design a strategy for modeling materials and interfaces to respond to a research problem
- Thoughtful readings of scientific articles and critical analysis of the methodology used in quantum modeling

Program overview:

This teaching unit deals with the quantum modeling of materials and interfaces, but also of molecules. This teaching comprises two parts: one concerns the theoretical study of the electronic structure of materials and inorganic molecular systems through reminders of the theory of molecular orbitals (fragment method) and an introduction to the theory of crystal orbitals; the other, in practical work, makes it possible to visualize the crystalline and binding properties of materials and interfaces (assisted graphic visualization).

1. The theory of molecular orbitals will be recalled, from the simple H₂ model to the models of metallic clusters. The concepts of the molecular fragment method will be discussed and applied to several emblematic molecular systems. The theory of crystalline orbitals will be then introduced (bands, DOS, COOP) for a rationalization of the electronic structures of crystalline materials. Band theory will be then applied to a few typical one-, two- and three-dimensional materials. The structural and electronic properties of surfaces will be described, as well as surface reconstruction phenomena. The adsorption of molecule-probe such as CO will be studied by an orbital analysis of surface bonds (Dewar-Chatt-Duncanson model) and the spectroscopic data will be correlated to the mode of adsorption. The evaluation of this part will consist in a written report.

2. A structural description of materials for catalysis and energy will be presented (Assisted graphical visualization). A classification according to their chemical bonds and their electrical properties will be proposed. The development of crystalline models of materials and active surfaces in catalysis will be carried out. The practical work will be carried out by the students in pairs who present their results in the form of an assessed oral presentation.

Outcomes

- master the concepts of orbital formalism, from H₂ to complex systems (inorganic compounds, organometallic clusters)
- know the concepts of band theory and the interpretation of the results obtained
- understand the research work in quantum modeling (critical analysis of the methodology used in a scientific article)
- know how to build periodic crystal models by numerical simulation in quantum chemistry to study of a problem of heterogeneous catalysis and of phenomena at interfaces
- adapt the level of theory to the problem studied (compromise precision / necessary resources, comparison with published methodologies)
- know how to present results in the expected format for research work (scientific publication, conference presentation)

Assessment methods

Project-based learning and scientific reports (individual project) and oral presentations

Ce cours sera dispense en langue anglaise.

Cette UE traite de la modélisation en chimie quantique de matériaux et interfaces

Objectifs

- Connaissances des matériaux pour la catalyse et l'énergie
- Description des propriétés structurales et électroniques par la théorie des bandes et les concepts orbitaux
- Compréhension du mode de liaison et de l'activation chimique de molécules adsorbées en fonction de l'orientation de la surface cristalline
- Concevoir une stratégie de modélisation des matériaux et des interfaces permettant de répondre à une problématique de recherche
- Lectures réfléchies d'articles scientifiques et analyse critique de la méthodologie employée en modélisation quantique

Heures d'enseignement

TP	TP	6h
CM	CM	20h

Pré-requis obligatoires

UE M1 Chimie théorique – théorie des orbitales moléculaires - initiation à la modélisation moléculaire .

Programme détaillé

Cette UE traite de la modélisation quantique des matériaux et interfaces, mais aussi des molécules. Cet enseignement comprend deux parties : l'une concerne l'étude théorique de la structure électronique des matériaux et des systèmes moléculaires inorganiques par des rappels de la théorie des orbitales moléculaires (méthode des fragments) et par une introduction à la théorie des orbitales cristallines ; l'autre, en travaux pratiques, permet d'appréhender les propriétés cristallines et de liaison de matériaux et d'interfaces (visualisation graphique assistée).

1. La théorie des orbitales moléculaires est rappelée, du modèle simple H₂ aux modèles d'agrégats métalliques. Les concepts de la méthode des fragments moléculaires sont évoqués et appliqués à plusieurs systèmes moléculaires emblématiques. La théorie des orbitales cristallines est alors introduite (bandes, DOS, COOP) pour une rationalisation des structures électroniques de matériaux cristallins. La théorie des bandes est alors appliquée à quelques matériaux types, uni-, bi- et tridimensionnels. Les propriétés structurales et électroniques de surfaces sont décrites, ainsi que les phénomènes de reconstruction de surface. L'adsorption de molécule-sonde telle que CO est étudiée par une analyse orbitale des liaisons de surface (modèle Dewar-Chatt-Duncanson) et les données spectroscopiques sont corrélées au mode d'adsorption. L'évaluation de cette partie est sous forme d'un rapport écrit sans oral.
2. Une description structurale de matériaux pour la catalyse et l'énergie est présentée (Visualisation graphique assistée). Une classification selon leurs liaisons chimiques et leurs propriétés électriques est proposée. L'élaboration de modèles cristallins de matériaux et de surfaces actives en catalyse est réalisée. Les travaux pratiques sont menés par les étudiants en binôme qui restituent leurs résultats sous forme d'une présentation orale évaluée.

Informations complémentaires

Les simulations numériques en chimie quantique (TP) sont basées sur des logiciels de recherche (IC2MP) et moyens informatiques (UFR SFA/UP et IC2MP) adaptés à un groupe de 16 étudiants au maximum (8 postes de travail fonctionnels avec licence pour le logiciel , salle Epicure, B7).

Compétences visées

- maîtriser les concepts du formalisme orbitalaire, de H₂ aux systèmes complexes (composés inorganiques, clusters organométalliques)
- connaître les concepts de la théorie des bandes et l'interprétation des résultats issus
- savoir déchiffrer des travaux de recherche en modélisation quantique (critique de la méthodologie employée dans un article scientifique)
- savoir construire des modèles cristallins périodiques pour l'étude par simulation numérique en chimie quantique d'un problème de catalyse hétérogène et de phénomènes aux interfaces
- savoir restituer ses résultats au format attendu pour des travaux de recherche (publication scientifique, présentation en congrès)

(Bibliographie) : variable suivant les sujets

Infos pratiques

Lieu(x)

Poitiers-Campus