

# 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
- Analysis of electronic properties by band theory
- Understanding of the binding mode and chemical activation of adsorbed molecules depending on the orientation of the crystal surface
- Design an interface modeling strategy to solve a research problem.
- Perform quantum calculations using DFT on periodic systems (initiation to a DFT code)
- Analyze and interpret the results obtained

**- Thoughtful readings of scientific articles and critical analysis of the methodology used**

**Program overview:**

This teaching unit deals with the quantum modeling of materials and interfaces. This course consists of two parts: one concerns the theoretical study of the electronic structure of materials through an introduction to the theory of crystalline orbitals, the other, in practical work, implements the concepts of quantum modeling of periodic systems - Mass crystalline materials and surfaces – by using a periodic quantum chemistry (DFT) code. 1. A structural description of materials for catalysis and energy will be presented (Computer aided graphic visualization). A classification according to their chemical bonds and their electrical properties will be proposed. The theory of crystalline orbitals will be then introduced (bands, DOS, COOP) for a rationalization of their electronic structures. The band theory will be then applied to some typical materials, one-, two- and three-dimensional ones. The structural and electronic properties of surfaces will be described, as well as the surface reconstruction phenomena. The adsorption of probe molecules such as CO will be studied by orbital surface bond analysis (Dewar-Chatt-Duncanson model) and the spectroscopic data will be correlated with the mode of absorption. The evaluation of this part will consist in a written report without oral examination.

2. The elaboration of crystalline models of materials and surfaces will be carried out. An introduction to a calculation code in periodic quantum chemistry will be taught (Linux environment). The practical work will be carried out by the students in pairs who will return their results as a written report that will be further evaluated. The principles of geometric and energetic optimization of crystal structures and surfaces will be discussed and implemented digitally. The calculation methodology will be analyzed and compared with data from the scientific literature. Surface reconstruction phenomena will be identified and the sites of adsorption of probe molecules will be characterized by the calculation of thermochemical quantities. The analysis of scientific articles in quantum chemistry in the field of heterogeneous catalysis and materials will be carried out by the students followed by an assessed oral presentation of the methodology.

**Outcomes**

- 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
- Analyse des propriétés électroniques par la théorie des bandes
- Compréhension du mode de liaison et de l'activation chimique de molécules adsorbés en fonction de l'orientation de la surface cristalline
- Concevoir une stratégie de modélisation des interfaces permettant de répondre à une problématique de recherche. Réaliser des calculs quantiques en DFT sur des systèmes périodiques (initiation à un code DFT)
- Analyser et interpréter les résultats obtenus ;
- Lectures réfléchies d'articles scientifiques et analyse critique de la méthodologie employée

## Heures d'enseignement

Modélisation en chimie quantique de matériaux et interfaces	TP	12h
Modélisation en chimie quantique de matériaux et interfaces	CM	10h
Modélisation en chimie quantique de matériaux et interfaces	TD	4h

## Pré-requis obligatoires

UE M1 Chimie théorique – théorie des orbitales moléculaires - initiation à la modélisation moléculaire – utilisation de l'environnement Unix/Linux.

## Programme détaillé

Cette UE traite de la modélisation quantique des matériaux et interfaces. Cet enseignement comprend deux parties : l'une concerne l'étude théorique de la structure électronique des matériaux par une introduction à la théorie des orbitales cristallines, l'autre, en travaux pratiques, met en œuvre les concepts de modélisation quantique de systèmes périodiques - matériaux cristallins massifs et surfaces - par l'utilisation d'un code de la chimie quantique périodique (DFT).

1. 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. La théorie des orbitales cristallines est alors introduite (bandes, DOS, COOP) pour une rationalisation de leurs structures électroniques. 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-Chat-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. L'élaboration de modèles cristallins de matériaux et de surfaces est réalisée. Une initiation à un code de calculs en chimie quantique périodique est dispensée (environnement Linux). Les travaux pratiques sont menés par les étudiants en binôme qui restituent leurs résultats sous forme d'un compte-rendu écrit évalué. Les principes d'optimisation géométrique et énergétique de structures cristallines et de surfaces sont abordés et mis en œuvre numériquement. La méthodologie de calculs est analysée

et confrontée aux données de la littérature scientifique. Les phénomènes de reconstruction de surface sont identifiés et les sites d'adsorption de molécules sondes sont caractérisés par le calcul de grandeurs thermochimiques. L'analyse d'articles scientifiques en chimie quantique dans le domaine de la catalyse hétérogène et des matériaux est réalisée par les étudiants suivi d'une présentation orale évaluée de la méthodologie.

## 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

- 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 adapter le niveau de théorie au problème étudié (compromis précision/ressources nécessaires, confrontation aux méthodologies publiées)
- savoir restituer ses résultats au format attendu pour des travaux de recherche (publication scientifique, présentation en congrès)

---

## Infos pratiques

### Lieu(x)

# Poitiers-Campus