

Quantum modeling in molecular and materials sciences/Modélisation quantique en sciences moléculaires et des matériaux

Niveau d'étude
Bac +5

ECTS
3 crédits

Composante
**Sciences Fondamentales
et Appliquées**

En bref

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

Présentation

Description

The course will be delivered in English.

This course deals with the geometric and electronic structure of molecular and solid-state compounds and the solid state. The principles of the theory of molecular and crystalline orbitals will be presented. The classic rules to rationalize the structural arrangements will be discussed (Zintl-Klemm concept, VSEPR, Wade-Mingos,...), in particular, the families of materials will be studied from chemical bonds point of view. The visualization and the structural study of crystalline compounds will be carried out using the computer graphics software VESTA (simulation of the peaks of a diffractogram). The analysis of the density of states, chemical bonds and surface reactivity will be studied for several crystalline systems of interest in materials science and heterogeneous catalysis.

Program overview:

Geometric and electronic structures of materials, surfaces and molecular systems (basic knowledges in crystal structures; theory of molecular and crystal orbitals).

Study of the elements required for structural determination (powder diffractometry) and the theory of crystalline orbitals

Study of the concept Zintl-Klemm, VSEPR, Wade-Mingos,...).

Analysis of the density of states, chemical bonds and surface reactivity for several crystalline systems of interest in materials science and heterogeneous catalysis.

Outcomes

Rationalize the structural and electronic properties of molecular and solid state compounds.

Analyze the electronic density of a compound using quantum chemical tools (OM, bands, DOS, COHP).

Correlate surface reactivity to surface properties.

Know how to write a project

Assessment methods

Project-based learning and scientific reports (individual project)

Ce cours sera dispense en langue anglaise.

Structures géométrique et électroniques de matériaux, des surfaces et de systèmes moléculaires (détermination de structures cristallines ; théorie des orbitales moléculaires et cristallines).

Objectifs

Etude des éléments nécessaires à la détermination structurale (diffractométrie de poudres) et la théorie des orbitales cristallines
Etude du concept Zintl-Klemm, VSEPR, Wade-Mingos, ...).

Analyse de la densité d'états, des liaisons chimiques et de la réactivité de surface pour plusieurs systèmes cristallins d'intérêt en sciences des matériaux et catalyse hétérogène.

Heures d'enseignement

Modélisation quantique en sciences moléculaires et des matériaux

TP

25h

Pré-requis obligatoires

Licence Chimie et Applications ou parcours équivalent ; UE Chimie du solide

Master Chimie M1 & Chimie et Physique M1 ; UE Chimie théorique

Programme détaillé

Cette UE traite de la structure géométrique et électronique de composés moléculaires et de l'état solide. Les principes de la théorie des orbitales cristallines sont exposés. Les règles classiques pour rationaliser les arrangements structuraux sont abordées (concept Zintl-Klemm, VSEPR, Wade-Mingos, ...). En particulier, les familles de matériaux sont exposées sous l'angle des liaisons chimiques. La visualisation et l'étude structurale de composés cristallins sont menées à l'aide du logiciel d'infographie VESTA (simulation des pics d'un diffractogramme). L'analyse de la densité d'états, des liaisons chimiques et de la réactivité de surface est réalisée pour plusieurs systèmes cristallins d'intérêt en Sciences des Matériaux et Catalyse Hétérogène.

Compétences visées

Rationaliser les propriétés structurales et électroniques de composés moléculaires et de l'état solide. Analyser la densité électronique d'un composé à partir d'outils de la chimie quantique (OM, bandes, DOS, COOP). Corréler la réactivité de surface aux propriétés de surface.

Savoir rédiger un projet