

# Electronic structures and surface reactivity of materials/Structures électroniques et réactivité de surface de matériaux

Niveau d'étude  
**Bac +4**

ECTS  
**3 crédits**

Composante  
**Sciences Fondamentales  
et Appliquées**

## En bref

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

## Présentation

### Description

The course will be delivered in English.

Understanding the Chemistry of Interfaces on model surfaces will be the key scientific question developed in this course in order to identify some processes for storing and converting energy with nanostructured catalytic systems and to analyze the electronic and structural structure of crystalline compounds (polymers, two-dimensional and bulk materials). This course has two parts: (i) Theoretical study of the electronic and geometric structure of materials by the theory of crystalline orbitals, and (ii) Experimental understanding of the structure and reactivity of mono-

and polycrystalline surfaces for processes of technological interest in energy conversion devices.

### Program overview:

1. A structural description of materials for catalysis and energy will be presented (use of 3D visualization programs for structural models, crystallography analysis). A classification according to their chemical bonds and their electrical properties will be proposed. The theory of crystalline orbitals will be introduced (bands, DOS, COOP) for a rationalization of their electronic structures. The band theory will be then applied to some standard materials, uni-, bi- and three-dimensional (e.g., organic and inorganic insulating and semiconductor polymers, graphene, hydrides, oxides, sulfides and transition metals). The structural and electronic properties of surfaces will be described, as well as the phenomena of surface reconstruction. The adsorption of probe molecules such as CO will be studied by an orbital analysis of surface bonds (Dewar-Chatt-Duncanson model) and the spectroscopic data will be correlated with the adsorption mode.

2. The above theoretical notions will be compared with experimental data generated by electrochemical tools - specifically surface electrochemistry - to address the structure and reactivity of well-oriented surfaces (surface reconstruction) and the study of multi-electron charge transfer processes which strongly depend on the oriented surface, e.g., hydrogen and oxygen evolution reaction; reduction of

molecular oxygen; and the use of carbon monoxide as a molecular surface probe. In addition, with the notions of band theory, the reactivity of semiconductors will also be discussed.

### Outcomes

- Knowledge of materials for catalysis and energy.
- Analysis of electronic properties using band theory.
- Understanding of the binding mode and chemical activation of adsorbed molecules as a function of crystal surface orientation.
- Understanding of Chemistry of Interfaces on model surfaces

### Assessment methods

Written examinations

### Ce cours sera dispensé en langue anglaise

Etude de la structure électronique et géométrique des matériaux par la théorie des orbitales cristallines et l'étude de la structure et la réactivité de surface monocristallines lors des processus de conversion d'énergie.

## 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.

La compréhension de la Chimie des Interfaces sur des surfaces modèles sera la question scientifique clé à développer en vue d'identifier certains processus pour

stocker et convertir l'énergie avec des systèmes nano structurés adressés dans d'autres modules en catalyse.

## Heures d'enseignement

Structures électroniques et réactivité de surface de matériaux - TP	TP	2h
Structures électroniques et réactivité de surface de matériaux - CM	CM	15h
Structures électroniques et réactivité de surface de matériaux - TD	TD	8h

## Pré-requis nécessaires

Licence de chimie ou diplôme équivalent dans le domaine

## Programme détaillé

Cet enseignement comprend deux parties : l'une concerne l'étude théorique de la structure électronique des matériaux, l'autre la compréhension expérimentale de la structure et réactivité de surface mono-, et polycristalline avec processus d'intérêt technologique.

- 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 (ex. polymères organiques et inorganiques isolants et semi-conducteurs, graphène, hydrures, oxydes, sulfures et métaux de transition). 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.

2. Ces notions théoriques seront confrontées aux données expérimentales acquises en utilisant l'outil électrochimique, - spécifiquement l'électrochimie de surface -, pour aborder la structure et réactivité de surface monocristalline (reconstruction de surface) à l'étude de processus de transfert de charge multiélectronique, e.g. réaction du dégagement d'hydrogène et du dioxygène ; réduction du dioxygène ; utilisation d'une sonde moléculaire de surface par adsorption du monoxyde de carbone, processus qui dépendent fortement de la surface orientée. En outre, avec les notions de la théorie de bandes, la réactivité de semi-conducteurs sera aussi abordée.

## Informations complémentaires

Les travaux pratiques proposés aux étudiants dans cette unité d'enseignement se réalisent avec du matériel de recherche essentiellement mis à disposition par le laboratoire IC2MP .

Une séance de TP nécessite un groupe réduit : **12 étudiants**  
**Max**