

5CI611 Chimie des surfaces et interfaces : expérience et modélisation									
Mots clés : Surfaces, interfaces, propriétés structurales, électroniques et réactionnelles, techniques expérimentales d'analyse des surfaces (principes et démonstrations sur appareils), modélisation (DFT), et applications.									
Responsable Monica Calatayud, PR, Laboratoire de Chimie Théorique, Sorbonne Université									
ECTS	Cours (h)	TD (h)	TP (h)	Tutorat (h)	Ecrit (%)	CC (%)	TP (%)	Oral (%)	Eval. répartie
6	40		8	12	100				non
<i>Descriptif de l'UE</i>									
<p>Ce module de cours comprend trois parties : des rappels ou des fondamentaux sur les surfaces, des descriptions poussées de techniques de caractérisation expérimentales et de modélisation des surfaces, placées dans le contexte de leurs applications. Les outils les plus courants de caractérisation et de modélisation des surfaces par : microscopie, spectroscopie et spectrométrie (STM, AFM, LEED, XPS, ToF-SIMS, ...) et approche théorique (DFT), sont décrits, comparés et montrés dans différents domaines d'application des matériaux : énergie, catalyse, biomatériaux, corrosion, microélectronique, aéronautique etc. Ce module doit permettre d'acquérir un ensemble complet de connaissances pour appréhender la chimie des surfaces de matériaux. Tous les étudiants intéressés par les matériaux, leur réactivité, les procédés et/ou chimie analytique et théorique sont concernés par ce module.</p>									
<i>Objectifs d'apprentissage</i>									
<p>Les objectifs de ce module concernent la compréhension générale des propriétés des surfaces et des mécanismes atomiques intervenant dans la réactivité des surfaces. Ils concernent également la compréhension des principes et de certains aspects pratiques des principales techniques de caractérisation chimique des surfaces, telles que la spectroscopie de photoélectrons (XPS) et la spectrométrie ionique à temps de vol (ToF-SIMS), ainsi qu'une initiation poussée des techniques de modélisation de la réactivité des surfaces par les outils de la chimie théorique.</p> <p>À la fin du module, les étudiants doivent pouvoir rapidement comprendre et critiquer, dans une publication scientifique, la démarche scientifique des auteurs et les moyens qu'ils se sont donnés pour appréhender une question de réactivité des surfaces. Ils doivent pouvoir discuter (justifier ou refuser), sur la base de leurs connaissances, d'autres approches réactionnelles proposées par l'examinateur. Ils doivent pouvoir proposer des combinaisons de techniques de caractérisation pour expliquer le plus précis possible des phénomènes de surfaces.</p>									
<i>Prérequis</i>									
L'étudiant doit maîtriser et savoir utiliser les connaissances de base en physique et chimie, acquises en premier cycle de l'enseignement supérieur et être capable de lire et de comprendre la littérature scientifique en anglais.									
<i>Langue⁽¹⁾</i>	<i>Cours, TD, TP</i> Anglais s'il y a des participants non-francophones ou si la majorité des étudiants le souhaitent ; si non français.						<i>Documents</i> Anglais et français	<i>Bibliographie</i> Anglais	

(1) D'une manière générale, les documents de cours sont à rédiger en anglais. Les sujets d'examen sont en anglais ou accompagnés d'une explication en anglais s'il y a des étudiants non francophones.

Fonctionnement de l'UE

Les thèmes abordés en cours seront les suivants :

1. Définition et structures des surfaces
2. Adsorption sur des surfaces

Chimie

3. Techniques d'analyse des surfaces :
 - a. Principes détaillés
 - b. Spectroscopies électroniques
 - c. Spectrométries ioniques
 - d. Spectroscopies vibrationnelles
 - e. Approche spectroscopique ou microscopique.
4. Illustrations par des applications à la résolution de problèmes liés à la réactivité des surfaces :
 - a. Surfaces modèles ou études de systèmes modèles.
 - b. Surfaces réelles
5. Techniques de modélisation des surfaces :
 - a. Introduction à la chimie calculatoire
 - b. Présentation des méthodes et des modèles
 - c. Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)
 - d. Calcul des propriétés électroniques, moléculaire et spectroscopiques
 - e. Stratégies de calculs : périodiques, finis, combinés (QM/MM), et dynamique (MD)
 - f. Thermodynamique atomistique dans la modélisation des surfaces et interfaces
6. Illustrations de dialogues expérience/théorie et prédictions des propriétés de surface.
 - a. Combinaison XPS/IR/RMN et théorie.
 - b. Présentation des index de réactivité des surfaces.

Les points 3 et 4 peuvent être présentés conjointement.

Particularité importante : séances de démonstrations sur équipement mi-lourd de laboratoire (XPS, ToF-SIMS, STM), et de pratique individuelle de la modélisation de surfaces par ordinateur.