



Responsable, coordinateur : Marco Saitta, PR UPMC (IMPMC)

Autres intervenants : Fabio Pietrucci, MCF UPMC (IMPMC)
Fabio Finocchi, DR CNRS (INSP)
Michele Casula, CR CNRS (IMPMC)

Cours dispensé en anglais

Objectif

Cette UE vise à donner les bases, en mécanique classique et statistique, de la Dynamique Moléculaire, ainsi que les éléments principaux de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), et de son implémentation dans les calculs *ab initio*. Elle présente également les fondements de méthodes avancées en thermodynamique, comme la Métadynamique, et en traitement des propriétés électroniques, comme la méthode Monte Carlo Quantique (QMC).

Cette UE permet aussi de développer une compétence pratique de la modélisation et de la simulation, appliquées à la matière condensée et aux matériaux, via un **projet numérique** avancé, effectué en binôme, avec rapport écrit (« article de recherche ») et soutenance orale (« conférence scientifique »).

Les compétences développées dans cette UE sont une maîtrise, à la fois théorique et pratique, des méthodes et des outils modernes de calcul et simulation atomique et moléculaire en matière condensée

Contenu

- Rappels de mécanique statistique : ensembles statistiques, moyennes temporelle et d'ensemble, lien avec la thermodynamique
- Dynamique Moléculaire : intégration des équations du mouvement, thermostats, pas de temps, supercellules de simulation, conditions périodiques, forces et potentiels
- Méthodes *ab initio* : théorie de la fonctionnelle de la densité, équations de Kohn-Sham, développement en ondes planes, bandes électroniques, perturbations (champ électrique, phonons) et fonctions de réponse
- Méthodes « énergie libre » : dynamique accélérée, exploration de l'espace des configurations, métadynamique, chemins de transformation
- Méthode Monte-Carlo Quantique : chaînes de Markov, algorithme de Metropolis, importance sampling, fonctions d'onde many-body, évolution en temps imaginaire, fonction de partition quantique thermique

NB : Cette UE, axée principalement sur des outils de type *ab initio*, offre une **complémentarité intéressante avec l'UE 5C209** « modélisation multiéchelle des systèmes moléculaires complexes » L'angle de vue est ici celui du physicien de la matière condensée. Des concepts similaires sont abordés dans l'UE de chimie quantique (5C208) où l'angle de vue est celui du chimiste théoricien.



RENTRÉE 2016-2017

UE de SMNO échangeables
avec les spécialités MAT et CAPT
du MASTER de CHIMIE

3 UE D'OUVERTURE

- physique et chimie des matériaux naturels
- physique des matériaux denses
- solides non-cristallins et hétérogènes

2 UE THÉMATIQUES

- surfaces et nanostructures
- computational materials science



5P448 Physique et Chimie des Matériaux Naturels PCMN

UE
D'OUVERTURE



Responsable, coordinateur : Etienne Balan, PR UPMC (IMPMC)

Autres intervenants : Guillaume Morin, DR CNRS (IMPMC)
Guillaume Morard, CR CNRS (IMPMC)
Karim Benzerara, DR CNRS (IMPMC)
Jennyfer Miot, MCF MNHN (IMPMC)

Contexte et objectifs

La structure, les propriétés et les mécanismes d'évolution des matériaux naturels sont au centre de thématiques scientifiques d'actualité portant aussi bien sur l'histoire et le fonctionnement des planètes, la gestion raisonnée des ressources minérales, ou encore l'impact des activités minières et industrielles sur notre environnement ainsi que l'atténuation naturelle et la remédiation des pollutions. L'étude de ces matériaux composites, chimiquement complexes, et susceptibles d'évoluer sur des échelles temporelles particulièrement longues dans des conditions thermodynamiques variées, en interaction avec le monde vivant, nécessite la mise en œuvre appropriée d'approches issues de la chimie et de la physique des matériaux.

Les objectifs de cette UE sont d'initier les étudiants aux spécificités des matériaux naturels tout en leur fournissant une perspective générale de la contribution des sciences de la matière à l'étude des systèmes naturels. Les étudiants pourront ainsi mettre à profit leurs connaissances de la physique et de la chimie des matériaux à l'étude de cas concrets et de matériaux originaux, tout en développant un regard critique sur les études réalisées dans ces domaines.

Contenu

L'UE est organisée autour de quatre thématiques :

- **La formation et la différenciation chimique des planètes** : réactivité et équilibres de phases à haute pression et haute température, fractionnements chimiques
- **La reconstitution géologique de l'histoire de la Terre et des planètes** : utilisation des minéraux marqueurs, limites de l'uniformitarisme, évolution minéralogique
- **La gestion durable et les usages des environnements naturels** : minerais et matériaux minéraux, interactions solides-solutions, qualité des sols et des eaux, chimie environnementale
- **La biominéralisation** : contrôle biochimique de la minéralisation, critères de biogénicité, conséquences globales

A partir d'exemples choisis, les enseignements s'attacheront à faire ressortir la spécificité des échelles spatiales et temporelles caractéristiques des systèmes naturels. Il s'agira de confronter les informations issues de modélisations et d'expérimentations en laboratoire aux observations sur les objets naturels, et de montrer comment les concepts de la thermodynamique et de la cinétique des processus physico-chimiques et les outils de la physique des matériaux fournissent des informations essentielles à la compréhension des processus naturels. Un accent particulier sera mis sur le rôle clef des processus d'oxydo-réduction, les propriétés des interfaces solides-solutions et les caractéristiques des matériaux nanodivisés, ainsi que la prise en compte de la structure réelle et défective des minéraux.



Responsable, coordinateur : Frédéric Decremps, PR UPMC (IMPMC)

Autres intervenants : Sandra Ninet, MCF UPMC (IMPMC)
Daniele Antonangeli, CR CNRS (IMPMC)

Objectif

- Illustrer et d'utiliser les concepts fondamentaux de la physique et de la chimie de la matière condensée d'un point de vue original et appliqué.
- Acquérir les connaissances de base (théoriques et expérimentales) des propriétés des solides et liquides sous conditions extrêmes de pression et température.

Présentation

Sous la forme de cours-séminaires, de lectures critiques d'articles scientifiques récents, de projets et de travaux pratiques, plusieurs aspects actuels de ce domaine de recherche seront abordés : physico-chimie des solides et liquides à haute densité, synthèse de nouveaux matériaux à propriétés remarquables (matériaux à haute densité d'énergie, matériaux ultra-durs, supraconducteurs haute-T_c, matériaux superioniques, nanocristallites...), structure et dynamique des intérieurs planétaires, nanomatériaux. L'évaluation s'effectuera sous la forme d'un contrôle continu (projet scientifique en collaboration avec un chercheur) et d'un examen final.

Contenu

- Equation d'état, magnétisme et structures électroniques en fonction de la densité des matériaux, physique des transitions de phase : enjeux expérimentaux et théoriques
- Techniques de caractérisation des propriétés des matériaux (diffraction, spectroscopies, simulations numériques, laser pompe-sonde) et de génération des conditions extrêmes (hautes pressions et hautes températures)
- Propriétés physiques de géomatériaux et constitutions des intérieurs planétaires
- Chimie sous pression, synthèse de nouveaux matériaux
- Propriétés et synthèse de nanomatériaux sous contraintes

Coloration « chimie » de l'UE

Thèmes abordés

- Variations et inter-relations entre énergie interne, enthalpie libre et entropie
- Transition de phases (solide/solide, solide/liquide, liquide/liquide) et diagramme de phase pour les corps purs
- Propriétés des mélanges sous haute pression, diagrammes binaires (composés stoechiométriques, démixtion, alliage)
- Influence de la pression sur les caractéristiques thermodynamiques d'une réaction chimique
- Propriétés orbitales et liaisons chimiques en fonction de la distance inter-atomique

Exemples traités dans ce cadre (études sous pression)

- Evolution des propriétés des solides moléculaires : délocalisation du proton, rupture des liaisons covalentes, symétrisation des liaisons, métallisation, polymérisation, ionisation
- Etudes de systèmes à électrons corrélés (3d, 4f) : hybridation et localisation électroniques.
- Synthèses de nouveaux matériaux à propriétés remarquables (matériaux à haute densité d'énergie, matériaux ultra-durs, supraconducteurs haute-T_c, matériaux superioniques, nanocristallites...)
- Constitution des intérieurs planétaires (chimie des manteaux et de la graine terrestre)



5P450 Solides non-cristallins et hétérogènes

SNCH

UE
D'OUVERTURE



Responsable, coordinateur : Laurent Cormier, DR CNRS (IMPMC)

Co-responsable : Jean-Baptiste d'Espinose, MCF ESPCI (PPMD)

Autres intervenants : Guillaume Ferlat, MCF UPMC (IMPMC)
Laurence Galois, MCF UPMC (IMPMC)
Emmanuelle Guillard, directrice du laboratoire mixte
CNRS-St Gobain « Surface du Verre et Interfaces »

Objectif

Ce cours vise à illustrer les relations structure-propriétés dans les verres et les matériaux cimentaires, ainsi qu'à montrer quelques outils expérimentaux spécialement dédiés à ce type de matériaux désordonnés (fonction de distribution de paire ou méthode PDF) ou particulièrement utiles pour des questions structurales ou de redox (absorption des rayons X, tomographie de rayons X, fluorescence X, RMN).

Contenu

La première partie du cours (36h) est axée sur la physique du verre (concepts thermodynamiques, théories de la transition vitreuse, théorie de la cristallisation), en abordant largement les aspects structuraux (ordre local et à moyenne distance), mais aussi dynamiques (vibrations, extension de la notion de phonons aux verres). Cette partie concerne les verres d'oxydes, mais aussi des verres plus "exotiques" (chalcogénures avec notamment les matériaux à changement de phase, verre métalliques, vitrocéramiques).

NB : *Ce premier volet se distingue de la partie « verres » de l'UE 5C606 (« matériaux inorganiques finalisés »), qui concerne principalement les verres industriels courants (en termes de fabrication et de propriétés d'usage), les verres pour le stockage des déchets nucléaires et l'altération des verres (en lien avec le patrimoine). On peut évaluer le recouvrement entre les deux UE à seulement 3 à 4h maximum.*

La deuxième partie du cours est axée sur les relations entre la structure, les propriétés et les fonctionnalités des matériaux minéraux utilisés dans les bâtiments (minéraux naturels, argiles, céramiques, ciments,...). Dans la perspective des actions de recherche actuelles dans ce domaine, on s'attache à expliciter l'origine nanométrique et colloïdale des propriétés d'usage macroscopique ou d'intérêt industriel. Une emphase particulière est mise sur l'impact environnemental de l'utilisation de ces matériaux et sur la façon d'y remédier.

NB : *Ce deuxième volet est probablement intégralement traité au sein l'UE 5C601 (« matériaux pour un monde durable ») dans la partie intitulée « Matériaux de grande diffusion » dispensée par Nicolas Lequeux (Professeur ESPCI, LPEM)*



Responsable, coordinateur : Geoffroy Prévot, CR CNRS (INSP)

Autres intervenants : Bernard Croset, DR CNRS (INSP)
Emmanuelle Lacaze, DR CNRS (INSP)

Objectif

Les propriétés des nanostructures, des systèmes à basse dimensionnalité ou de tailles réduites, sont extrêmement sensibles aux surfaces et/ou des interfaces. L'objectif est d'introduire les aspects théoriques et expérimentaux liés à la structure atomique et électronique des surfaces. La surface des matériaux est ensuite considérée comme support de divers systèmes nanostructurés.

Les outils courants à l'étude des surfaces sont introduits (diffraction d'électrons lents, diffraction rayons X rasant, microscopie tunnel et à force atomique, spectroscopie d'électrons, effet Auger, ...).

Contenu

Le cours est divisé en 5 chapitres :

- **Structure des surfaces cristallines** (cristallographie et groupes planaires, techniques expérimentales de diffraction (LEED, GIXD) et de microscopie (STM, AFM)
- **Thermodynamique des surfaces** (grandeurs d'excès, forme d'équilibre d'une goutte liquide et d'un solide, relation de Shuttleworth, construction de Wulff)
- **Adsorption sur les surfaces** (aspects thermodynamiques, chimisorption, physisorption)
- **Interactions sur les surfaces** (auto-assemblage, interaction élastique et auto-organisation, réactivité et catalyse, mécanismes de croissance)
- **Nano-objets** : évolution d'assemblées de nanoparticules (mûrissement), propriétés électroniques (nanoparticules métalliques et résonance de plasmon, nanoparticules semi-conductrices et émission de lumière), déformations (tension de surface pour les fluides et contrainte de surface dans les solides, techniques expérimentales par diffraction de rayons X et interférométrie holographique d'électrons)

NB : Cette UE étant principalement axée sur les propriétés structurales et thermodynamiques des surfaces et des nanostructures, avec des aspects de catalyse et de chimisorption, elle offre une **complémentarité intéressante avec l'UE 5C205** « microscopie et spectroscopie des surfaces et des nano-objets ».