

Physico-chimie quantique et solides



Composante
École Nationale
Supérieure des
Ingénieurs en
Arts Chimiques



Volume horaire
12h

En bref

> **Code:** LP19AH9D

> **Ouvert aux étudiants en échange:** Oui

Présentation

Objectifs

Comprendre et interpréter les résultats d'un calcul de physico-chimie quantique sur des solides.
Appréhender les relations entre échelles microscopique et macroscopique.

Syllabus

Notions de physique du solide (Gaz d'électrons ; Bandes d'énergie ; Fonctions de Bloch).

Application de la DFT à l'étude de systèmes cristallins (énergie de cohésion, paramètres cristallins, constantes élastiques, propriétés électroniques, structure de bandes, énergie de surface, réactivité de surface vis à vis de petites molécules..).

Code de calcul.

Informations complémentaires

cours et TD en salle informatique