

## 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