

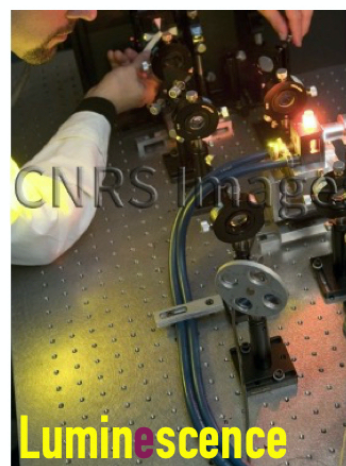
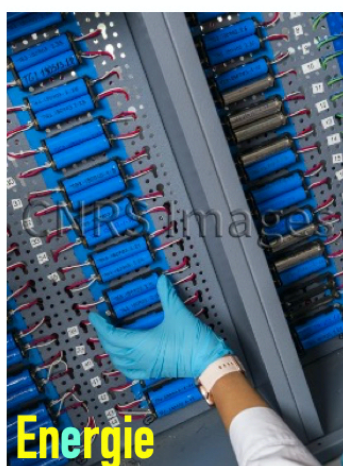
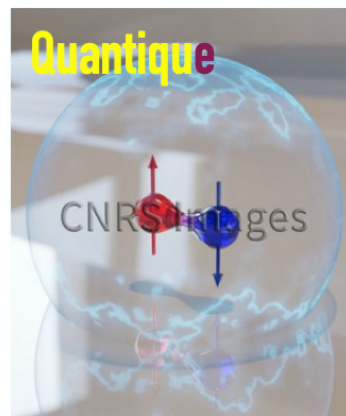
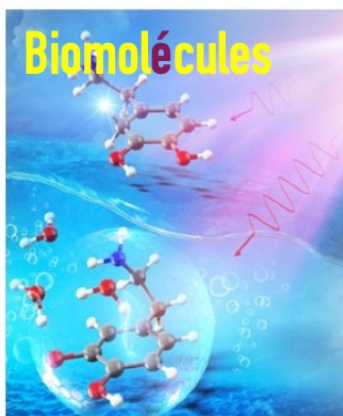
3^{ème} école d'été

université
PARIS-SACLAY

du 3 juillet
au 7 juillet
2023

de Chimie
Physique

**Nouveau
Programme!**



Renseignements et inscriptions :
F. Gatti, L. Barreau et D. Peláez Ruiz

3ème école d'été

Physico-chimie et problématiques sociétales contemporaines

Coordination : Lou Barreau, Daniel Peláez Ruiz et Fabien Gatti

Courriel contact : fabien.gatti@universite-paris-saclay.fr

Téléphone : 01 69 15 82 83

Lieu : Campus Université Paris-Saclay

Dates : Du lundi 3 juillet au vendredi 7 juillet en soirée.

Public ciblé :

Autour de vingt étudiant(e)s des universités de Paris-Saclay, d'Évry-Val-d'Essonne et de Versailles-Saint-Quentin-en-Yvelines. Les étudiants visés en priorité suivent un cursus de niveau **L3 en chimie et/ou physique** avec une appétence pour l'interface entre les deux disciplines, mais l'école est aussi ouverte à des étudiants de niveau **M1 ou M2**. Acceptation sur dossier et recommandation des enseignants. Pas de frais d'inscription pour les étudiants, **les repas du midi et les pauses cafés sont compris**. **Les étudiant(e)s peuvent sans problème insérer l'école dans le cadre d'un stage de recherche** : il suffit de l'indiquer dans la convention de stage.

Objectifs :

L'idée de créer une école sur l'université de Paris-Saclay tous les ans est née dans le cadre de la fédération de Chimie Physique Paris Saclay (FCPPS) dont Fabien Gatti est le « référent formation ». Le but de l'école est de sensibiliser les étudiants à **l'importance de l'interdisciplinarité** en particulier **autour de la chimie et de la physique : les technologies quantiques impliquant des molécules, la biophysique et la biochimie, l'astrophysique et l'astrochimie, l'étude du patrimoine, etc...** et aux possibilités considérables de formation offertes par l'université dans ces domaines. Le nombre d'étudiants sera réduit : l'objectif est de cibler des étudiants très motivés qui seront susceptibles de continuer dans les filières où la physico-chimie ou la physique moléculaire sont importants et éventuellement même faire un doctorat dans ce domaine. D'autre part, un nombre réduit d'étudiant permet d'organiser des travaux pratiques dans les laboratoires : le but est de faire entrer les étudiants dans le monde de la recherche et de leur montrer les équipements expérimentaux. Les étudiants qui n'auraient pas été sélectionnés en L3 et qui seraient très motivés seront soutenus pour assister à l'école lors de leur M1 ou M2. **Les journées sont dédiées chacune à une thématique particulière, et sont composées de présentations scientifiques, de visites de laboratoire et de travaux pratiques avec de l'équipement de recherche. Une visite du synchrotron SOLEIL est organisée le mercredi 05/07 après-midi.**

Programme Prévisionnel

Lundi 03/07/21

Molécules et matériaux photo-actifs

Intervenants : *Laboratoire de Photophysique et Photochimie Supra et Macromoléculaire (PPSM): Isabelle Leray, Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO) : Lou Barreau, Rachel Méallet-Renault, Laboratoire Lumière, Matière et Interfaces (LuMIn): Elsa Cassette, Emmanuelle Deleporte, Jean-Sébastien Lauret.*

Enjeu sociétal et intérêt scientifique :

Les pérovskites halogénées sont des matériaux semi-conducteurs qui se sont révélés très prometteurs comme matériaux photo-actifs pour les dispositifs photovoltaïques, diodes électroluminescentes, photo-détecteurs et lasers. Présents sous différentes structures et formes, ils sont synthétisables par des méthodes chimiques relativement simples et peu coûteuses. Cependant, plusieurs questions restent en suspens vis-à-vis de leurs propriétés optiques et électroniques, et dont la résolution pourrait avoir des implications directes sur l'efficacité des dispositifs. Dans ce TP, nous mettrons en évidence quelques propriétés de nanocristaux de pérovskite halogénées par des techniques de spectroscopie optique.

Mardi 04/07/21

Biomolécules

Structure, dynamique et réactivité de molécules d'intérêt biologique

Intervenants : Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO, équipe SYSIPHE) : Pierre Carçabal, Gilles Grégoire, Niloufar Shafizadeh, Satchin Soorkia, Anne Zehnacker.

Enjeu sociétal et intérêt scientifique :

Comprendre la relation structure-activité des molécules biologiques telles que les protéines, brins d'ADN, oligosaccharides, photo chromophores nécessite d'abord de connaître précisément les propriétés intrinsèques des briques élémentaires qui constituent ces macro molécules, en l'absence des interactions avec leur environnement. L'avènement de techniques de mise en phase gazeuse douce permettent d'étudier ces systèmes isolés et leurs complexes dont la stœchiométrie est connue par spectroscopie laser. Les études structurales sont menées dans le domaine IR pour sonder les modes de vibrations moléculaires. Les études dynamiques sont centrées sur les processus intervenants dans les états électroniques excités, transfert de charge, d'énergie, et relaxation du système vers l'état fondamental. Ces données expérimentales précises permettent de valider les méthodes théoriques de chimie quantique qui sont ensuite utilisées par exemple pour rechercher de nouveaux types de médicaments (drug-design) ou mieux comprendre la photo stabilité de certaines molécules du vivant.

Mercredi 05/07/21

Astrochimie

Intervenants : *Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO, équipes SIM2D et SYSTEMAE, ICP) : Lionel Amiaud, Séverine Boyé-Péronne, Emmanuel Dartois, Béranger Gans, Anne Lafosse, Marie-Aline Martin-Drumel, Olivier Pirali, Claire Romanzin, Roland Thiessen*

Enjeu sociétal et intérêt scientifique :

La matière interstellaire constitue la majorité de la matière de notre Galaxie, la Voie Lactée. Le milieu interstellaire est un laboratoire physico-chimique où l'on rencontre des conditions extrêmes en températures, faibles densités et exposition au rayonnement. Il s'agit de montrer comment des avancées obtenues durant les quarante dernières années en matière d'observation astronomique et d'exploration spatiale d'un côté, et d'expérimentation en laboratoire et de techniques d'analyses physico-chimiques de l'autre, ont beaucoup fait évoluer nos connaissances sur la composition du milieu interstellaire et sur l'histoire de la matière dans le Système solaire, et posent des problématiques scientifiques complexes et des voies de recherches nouvelles pour lesquelles les compétences interdisciplinaires de physico-chimistes sont essentielles.

Jeudi 06/07/21

Matériaux pour l'énergie

Intervenants : Service Nanosciences et Innovation pour les Matériaux, la Biomédecine et l'Energie (NIMBE) : Magali Gauthier, Nathalie Herlin-Boime, Sophie Le Caër et Suzy Surblé.

Enjeu sociétal et intérêt scientifique :

Les besoins croissants en énergie de la population mondiale, actuellement principalement assurés par les combustibles fossiles, posent de graves problèmes environnementaux. Il est donc nécessaire de privilégier des énergies moins polluantes et renouvelables, comme l'énergie solaire, éolienne etc.... Comme ces sources d'énergie sont intermittentes par nature, il est nécessaire de stocker efficacement l'énergie afin de pouvoir la restituer selon les besoins. Dans ce contexte, les dispositifs de stockage de l'énergie par voie électrochimique sont particulièrement intéressants. Ainsi, les batteries lithium-ion offrent de bonnes performances en termes de densité d'énergie et de puissance massique. Cependant, et par exemple dans le contexte des applications dans le transport (véhicules électriques), il est nécessaire d'augmenter l'autonomie et de diminuer les temps de recharge des véhicules, ce qui implique d'améliorer les performances électrochimiques de ces batteries, et de diminuer autant que possible le vieillissement auquel elles sont soumises. Il s'agira ici de sensibiliser les étudiant(e)s au fonctionnement de ces batteries, aux différentes mesures qui permettent de caractériser leur fonctionnement, et à la chimie à l'œuvre dans les différentes parties du système. Une introduction à la radiolyse (qui consiste en l'interaction entre les rayonnements ionisants et la matière), qui permet notamment de générer des phénomènes de vieillissement de manière accélérée et de les étudier finement, sera également effectuée.

Vendredi 07/07/21

Approches quantiques pour la simulation des systèmes moléculaires

Défis, théorie et simulations

Intervenants : Federica Agostini (ICP) et David Lauvergnat (ICP)

Enjeu sociétal et intérêt scientifique :

Nous aurons deux interventions portant sur les théories et méthodes numériques dans le cadre de la simulation de processus induits par la lumière et des vibrations moléculaires de systèmes confinés. Dans un premier moment, on abordera les processus chimiques et physiques activés par la lumière, dits alors photochimiques ou photophysiques, qui sont à la base du fonctionnement de dispositifs comme les cellules photovoltaïques et les diodes électroluminescentes organiques, d'intérêt aujourd'hui pour la production d'énergie efficace et durable. Du côté de la théorie, les processus moléculaires ultra-rapides à la base de la photochimie et de la photophysique sont décrits en simulation en appliquant des techniques de simulation de dynamique moléculaire des états excités, dite dynamique non-adiabatique. Ces techniques interfacent une description quantique du mouvement des électrons à une description classique des noyaux. Enfin, le focus sera mis sur la théorie quantique de base et sur les approximations introduites pour arriver à des algorithmes de dynamique moléculaire qui permettent de mener des simulations on-the-fly avec le support de codes de chimie quantique. La deuxième présentation portera sur les enjeux associés à la description purement quantique de phénomènes physiques ou chimiques (structure électronique, spectroscopie rovibronique, photochimie ...). Pour un système avec n degrés de liberté ($q_1, q_2 \dots q_n$) décrit par un Hamiltonien, $\hat{H}$, l'expression de l'équation de Schrödinger indépendante du temps semble simple :

$$\hat{H} \Psi(q_1, q_2 \dots q_n) = E \Psi(q_1, q_2 \dots q_n)$$

avec $\Psi(q_1, q_2 \dots q_n)$ et E , l'état de système et son énergie. Cependant la résolution analytique est impossible sauf pour des modèles ou des systèmes simples (atome d'hydrogène, oscillateur harmonique ...). Pour contourner cette difficulté, il faut recourir à des approches numériques implémentées dans des codes informatiques. Plusieurs approches seront décrites permettant de répondre aux questions suivantes seront : (i) comment représenter l'état quantique ?; (ii) comment calculer l'action de l'Hamiltonien ?; et (iii) comment déterminer l'évolution d'un état au cours du temps ?

Comme illustration, on va considérer un système composé de molécules de H_2 encapsulées dans des clathrates hydrates dont le but est de stocker l'hydrogène. L'étude de ses mouvements couplés à la cage nécessite un traitement quantique qui permettront d'illustrer ces techniques numériques.