

**FICHE DESCRIPTIVE D'UN MODULE DE FORMATION**

<b>12-E388-01</b>	<b>CHIMIE THEORIQUE DE L'ETAT SOLIDE</b>
-------------------	--

Approches théoriques de l'état solide, des surfaces et des interfaces

Atelier Sensibilisation		Organisation : ED 388 Chimie Phys
Durée : 3 jours		Contact email : <a href="mailto:denise.depeindray@ens.fr">denise.depeindray@ens.fr</a>
1 sessions/ an	20 places/session	Recommandé en <input checked="" type="checkbox"/> 1 <sup>re</sup> <input checked="" type="checkbox"/> 2 <sup>e</sup> <input checked="" type="checkbox"/> 3 <sup>e</sup> année

**Objectifs**

- Avoir une vue d'ensemble des méthodes de Chimie Quantique des systèmes périodiques et de leurs possibilités.
- Maîtriser les concepts propres aux solides (espace réciproque, bandes, densités d'état, COOP)
- Initiation aux logiciels de Chimie Quantique du solide.

**Contenu**

- Présentation simplifiée de la description de systèmes vérifiant la symétrie de translation, modèle de l'électron libre, sommes de Bloch, distorsion de Peierls.
- Initiation aux calculs paramétrés (tight-binding, EHT périodiques) et ab initio (CRYSTAL et VASP)
- Calcul des propriétés et d'indices de réactivité: niveau de Fermi, DOS, COOP, structure, réactivité
- Application aux problèmes d'adsorption sur métaux et oxydes.

**Responsable pédagogique / Formateurs**

Christian Minot, Professeur à l'Université Pierre et Marie Curie

**Pré-requis éventuel**

**Pour en savoir plus (calendrier, places disponibles, etc.) :** <http://www.chimie.ens.fr/ed388>

*Date de mise à jour de la fiche (mois/année) : septembre 2006*