

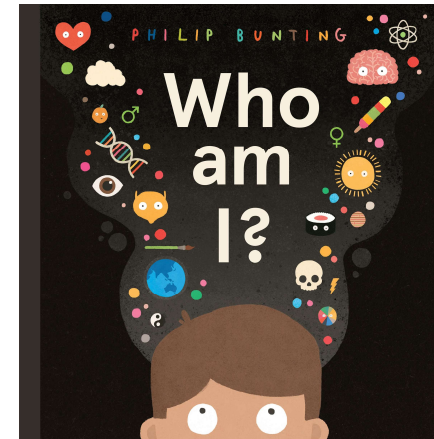
NEW

# Service de Chimie Physique Théorique

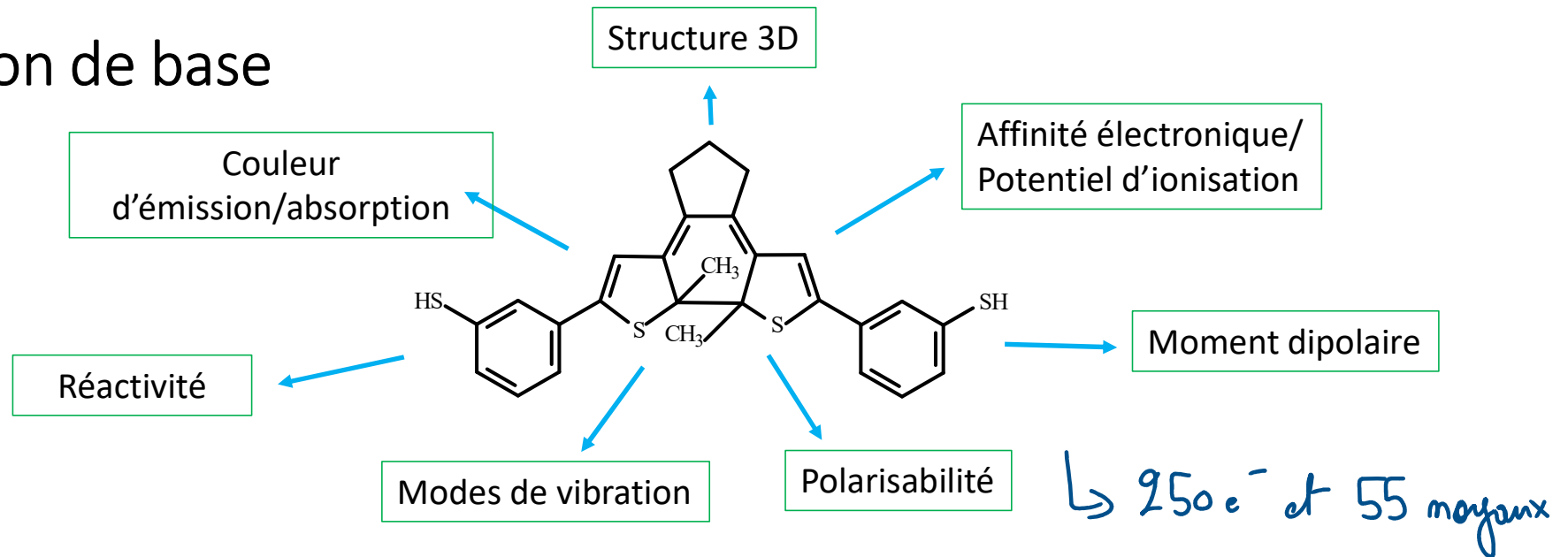
Présentation du service  
en 10 minutes

## *Colin Van Dyck*

- Physicien
- Chercheur depuis 2009: Physique avec des molécules
- Chargé de cours depuis 2019: Enseignement de la physique et des maths sur le site de Charleroi



# Motivation de base



Questions fondamentales de la chimie : (i) **Pourquoi cet assemblage d'atomes possède ces propriétés ?**  
 (ii) **Peut-on les prédire ?**

Réponse des physiciens: (i) **car  $H\Psi_{\text{mol}} = E\Psi_{\text{mol}}$**   
 (ii) **en théorie oui, il faut trouver  $\Psi_{\text{mol}}$  pour :**

$$H = \sum_{i=1}^{N_e} \frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{J=1}^{N_m} \frac{-e^2 Z_J}{4\pi\epsilon_0 \cdot r_{iJ}} + \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j \neq i} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \cdot r_{ij}} + \sum_{J=1}^{N_m} \frac{-\hbar^2}{2M_J} \nabla_J^2 + \sum_{J=1}^{N_m} \sum_{K \neq J} \frac{e^2 Z_J Z_K}{4\pi\epsilon_0 R_{JK}}$$

# Comment faire ?

$\Psi_{\text{mol}}$  dépend de 1165 variables corrélées pour la molécule exemple

Calculer la fonction d'onde d'une molécule = Enorme challenge !

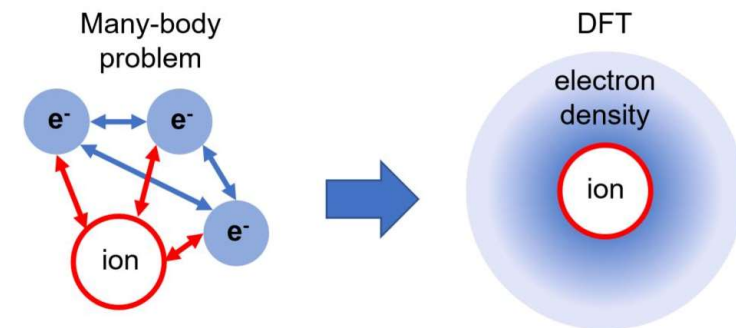
On peut y arriver relativement bien... grâce à:

1. Beaucoup d'approximations: Born-Oppenheimer, Hartree-Fock, Interaction de configurations,...
2. Beaucoup de méthodes d'analyse numérique
3. Beaucoup de processeurs

Alternative très avantageuse: **théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)**

1. Théorèmes disent qu'il est possible de chercher  $\rho$  à la place de  $\Psi$
2.  $\rho$  permet de prédire souvent plus précisément les propriétés moléculaires qu'en utilisant  $\Psi$ , tout en étant computationnellement plus léger

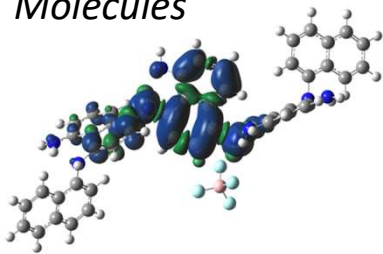
Grand succès -> prix Nobel pour ce développement



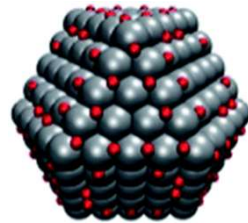
# Activité typique du service

On calcule (souvent avec la DFT) la structure électronique de systèmes jusqu'à 1000 atomes, par exemple :

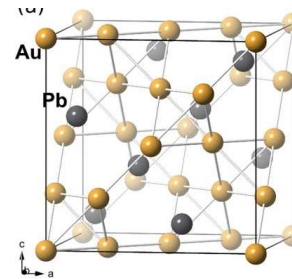
*Molécules*



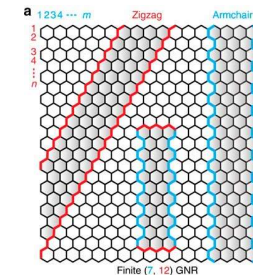
*Nanoparticules*



*Solides*



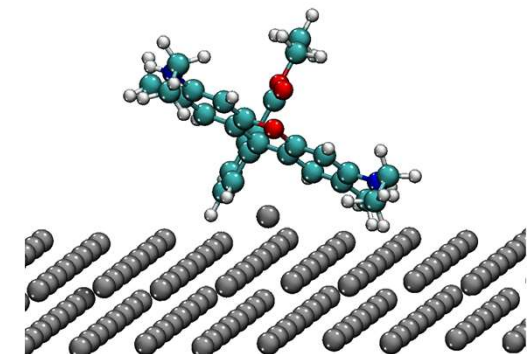
*Matériaux 2D*



Et on l'utilise pour expliquer les propriétés de dispositifs relevant des nanotechnologies

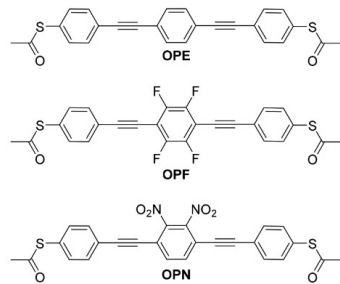
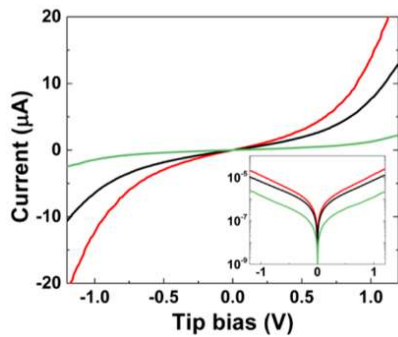
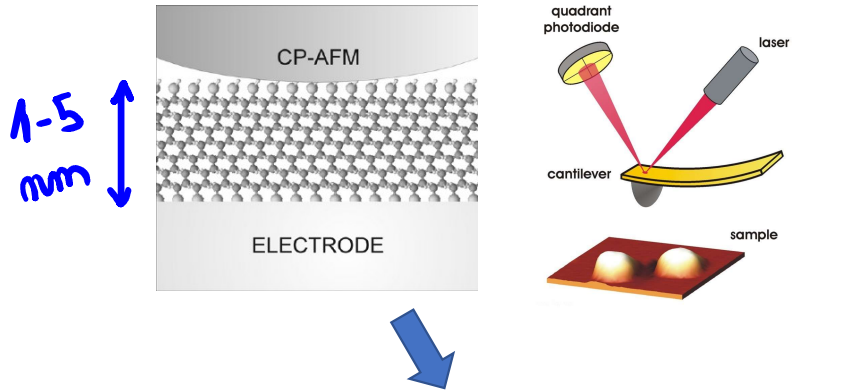
Intérêt particulier de recherche :

**Systèmes nanométriques où le couplage physique entre une molécule et un autre matériaux joue un rôle prépondérant**



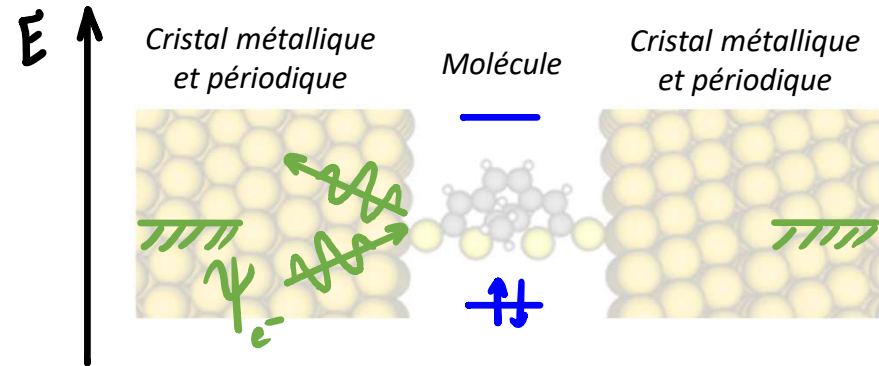
# Exemple A : couplage électronique

Système expérimental :



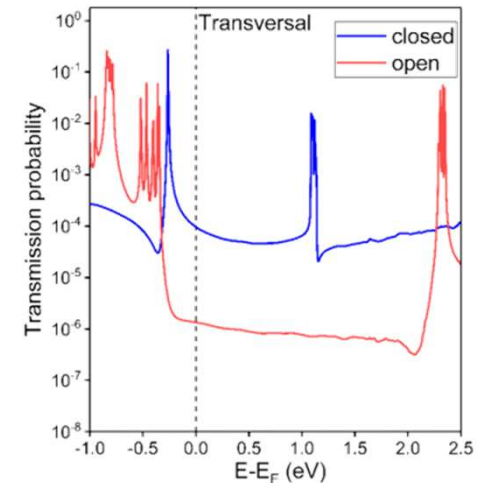
On arrive maintenant à faire des diodes, transistors, capacitances,... moléculaires  
= **Electronique moléculaire**

Système théorique :

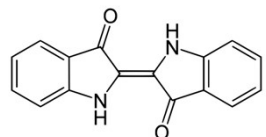


Molécule ~ fine barrière  
→ les ondes électroniques sont transmises par **effet tunnel** !

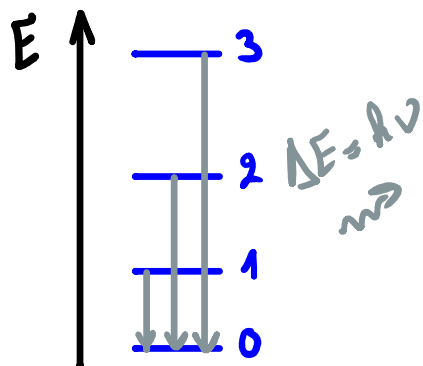
Grâce à la DFT, on peut simuler la **probabilité de transmission** et comprendre la forme des courbes I/V



# Exemple B : couplage optique



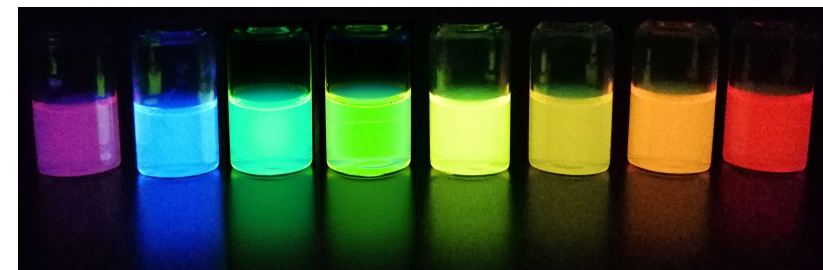
$$I_{dip} \sim \left| \int \Psi_{exc} \nabla \Psi_0 d\vec{x} \right|^2$$



→ bien connu des chimistes car dicte en grande partie la probabilité d'observer une transition avec émission de lumière

→ si  $I = 0$  on parle de '**transitions interdites**'

→ fondamental pour la compréhension des phénomènes photochimiques (fluorescence, écran OLEDs, photosynthèse,...)



## Effet Purcell:

Si molécule est placée près de nanoparticules métalliques, l'intensité d'émission peut être décuplée des milliards de fois.

Certaines transitions 'interdites' deviennent visibles.

$$I_{tot} \sim \left| \int \gamma_{exc} \nabla \Psi_0 d\vec{x} \right|^2$$

Schrödinger

Maxwell

Schrödinger



Mhamad

*Pour discuter:*

- Aile droite, 2<sup>ème</sup> étage, bâtiment IV
- [Colin.VanDyck@umons.ac.be](mailto:Colin.VanDyck@umons.ac.be)

Merci pour votre attention !