

# Service de Chimie Physique Théorique

Colin Van Dyck - Université de Mons

Le service propose les deux sujets décrits ci-dessous.

## 1 Introduction à la DFT : simulation des fonctions de travail

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est le concept qui a généré le plus grand nombre de citations d'articles de toute l'histoire de la physique. Cette théorie propose de reformuler la mécanique quantique en utilisant la densité électronique, en lieu et place de la fonction d'onde. Cela mène à une simplification spectaculaire du problème, et permet maintenant de simuler sur ordinateur les propriétés quantiques de systèmes complexes possédant jusqu'à 1000 atomes en interaction. Cela rend la DFT universelle et lui permet de trouver des applications en physique, en chimie, en biologie ou encore en sciences pharmaceutiques. Ce stage a pour but d'initier l'étudiant à cette théorie en l'appliquant à un problème concret. Celui-ci consiste à simuler théoriquement la fonction de travail des électrodes d'or. Ce paramètre est d'utilité fondamentale en électronique, car il contrôle directement la barrière à franchir pour injecter ou collecter des charges dans des dispositifs divers comme les cellules solaires ou les diodes luminescentes.

## 2 Utilisation des bases de gaussiennes pour la résolution numérique de l'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger est techniquement impossible à résoudre lorsque l'on s'intéresse à des systèmes plus complexes que l'atome d'hydrogène, c-à-d, les autres atomes ou les molécules. Il est cependant possible d'approximer numériquement les fonctions d'onde et niveaux d'énergie de ces systèmes grâce à une riche variété de méthodes numériques (typiquement via l'approximation Hartree-Fock et ses raffinements). Sur un ordinateur, il n'est possible de représenter les fonctions d'onde que dans un espace mathématique limité. La taille de cet espace dicte directement le temps de calcul et il importe de choisir intelligemment un nombre minimal de fonctions de base pour optimiser le temps de calcul. Ce stage a pour but d'introduire l'étudiant à l'utilisation des fonctions gaussiennes centrées sur les atomes pour développer les fonctions d'onde. Ce stage permettra d'effectuer une illustration concrète du principe variationnel de la mécanique quantique, via l'évaluation numérique des niveaux d'énergie de systèmes atomiques ou moléculaires.

**Contact** Pour toute question : [colin.vandyck@umons.ac.be](mailto:colin.vandyck@umons.ac.be)