

Jean-Yves Saillard

Institut des Sciences Chimiques de Rennes (UMR-CNRS, 6226)

Université de Rennes, 35000 Rennes

Liaison chimique et stabilité chimique

Ce qui fait qu'une molécule (ou un composé solide) « existe » résulte de la formation de liaisons entre les atomes qui la (le) composent. Les concepts de stabilité chimique et de liaison chimique sont donc intimement liés. Nous nous intéresserons aux relations entre ces deux notions et nous montrerons, à l'aide de raisonnements orbitaux simples, qu'il est souvent possible de décrire la structure électronique d'un composé d'une façon certes très qualitative, mais suffisante pour comprendre sa structure et sa stabilité. Un accent particulier sera porté sur les règles qui relient la structure d'un composé chimiquement stable à son nombre d'électrons de valence (octet, 18 électrons, Wade-Mingos, superatomes...) ainsi qu'à leurs exceptions. Pour plus de simplicité, les exemples traités seront avant tout moléculaires, mais les concepts de base sont transférables à l'état solide, moyennant quelques précautions.

Enric Canadell

Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC)

Campus de la UAB

08193 Bellaterra-Spain

Les interactions orbitales:

de Hückel aux liaisons fortes et de la molécule au solide

On montrera que la théorie des orbitales moléculaires, utilisée pour étudier la structure électronique des molécules, et la théorie de bandes, utilisée pour les solides périodiques, ne sont que des variations sur la même idée. On introduira les idées principales nécessaires à l'analyse de la corrélation entre la structure cristallographique et la structure électronique des solides : bande d'énergie, densité d'états, distorsion périodique, surface de Fermi, etc. On montrera que, indépendamment de la méthodologie de calcul utilisée, la construction qualitative de la structure de bandes, densité d'états et ses projections, surface de Fermi, fonction de Lindhard etc. d'un solide à partir de l'interaction d'orbitales est un outil simple et très riche pour comprendre non seulement les résultats de calcul mais aussi comment ces résultats sont liés aux détails de la structure du solide. La discussion se fera tant que possible en utilisant des systèmes réels.

Enric Canadell

Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC)

Campus de la UAB

08193 Bellaterra-Spain

Rationaliser les propriétés dans le solide

Essentiellement, on va utiliser les idées développées dans le cours précédent (les interactions orbitales de Hückel) pour élaborer des modèles simples et comprendre différentes propriétés structurales, de transport, optiques, etc. On regardera des problèmes comme l'origine des ondes de densité de charge dans NbSe₃ et TaS₃, la nature de la transition semi-métal-isolant de monocouches de TiSe₂, comment utiliser la tension pour contrôler les propriétés optoélectroniques de monocouches de TiS₃, pourquoi le métal moléculaire α -(BEDT-TTF)₂KHg(SCN)₄ montre une anomalie de résistivité à basse température? L'analyse simple sera comparée à des résultats expérimentaux ou à des calculs précis.

Introduction aux calculs premiers principes- DFT

Xavier Blase

Institut Néel, CNRS - Université Grenoble-Alpes, Grenoble

Après avoir discuté de la complexité exponentielle du problème à N-corps exact, nous introduirons les approximations de champ moyen, et en particulier la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) pour l'énergie de l'état fondamental. Bien qu'exacte, cette théorie requiert en pratique une expression pour le potentiel d'échange-corrélation, c'est-à-dire le terme d'interaction électron-électron au delà du potentiel classique de Hartree. Des expressions en fonction de la densité seule aux approches hybrides introduisant une portion d'échange exacte, cette recherche de fonctionnelle reste au coeur de la DFT et de sa généralisation aux problèmes dépendant du temps pour l'absorption optique (TD-DFT). Nous introduirons quelques idées permettant de mieux comprendre la pertinence des choix de fonctionnelle. Nous concluerons par le théorème de Hellmann-Feynman ouvrant la voix au calcul des forces ioniques, à la relaxation structurale et à la dynamique moléculaire.

Calcul de la structure électronique: défis et avancées

Xavier Blase

Institut Néel, CNRS - Université Grenoble-Alpes, Grenoble

Le calcul des niveaux d'énergie électronique, tels que mesurés par la photoémission, introduit la notion d'excitation électronique chargées au delà de l'état fondamental à N-corps. Nous constaterons tout d'abord que la structure de bande "de Kohn-Sham" dans le cadre de la DFT n'est pas un formalisme de la structure électronique même si, en pratique, des stratégies permettent d'obtenir de bons résultats. Nous introduirons au delà du champ moyen les théories de perturbation à N-corps reposant sur la fonction de Green à 1-corps dont la représentation spectrale repose par définition sur ces énergies d'excitations électroniques chargées. De nouveau, le problème de l'interaction électron-électron se présente, et nous présenterons l'approximation dite de GW issue d'une théorie de perturbation et non pas du champ moyen. Les succès et limites de cette approche seront discutés.

Spectroscopies XPS, ARPES et EELS

Daniel Malterre

Institut Jean Lamour, CNRS, Université de Lorraine, Nancy

Les spectroscopies d'électron (XPS, ARPES, EELS) sont des techniques haute énergie (non-thermodynamiques) donnant accès aux états excités d'un solide. Après avoir brièvement présenté le principe de ces techniques, nous discuterons les informations qu'elles permettent d'obtenir sur les propriétés physico-chimiques et la structure électronique. Alors que XPS et EELS permettent d'exciter les électrons de coeur des atomes et d'obtenir les degrés d'oxydation des éléments, l'ARPES permet d'étudier la bande de valence. Différents niveaux d'interprétation sont requis. Lorsque les interactions électron-électron sont faibles, une approche à un électron est légitime. Elle permet de déterminer la dispersion $E(k)$ des bandes et la surface de Fermi qui peuvent être comparées aux calculs DFT. En revanche, lorsque les interactions électron-électron sont importantes, une approche à N corps est indispensable. Un spectre de photoémission est proportionnel à la partie imaginaire de la fonction de Green à un électron et donne des informations sur les interactions (renormalisation de la masse, temps de vie des quasi-particules, excitations virtuelles...). Ces notions seront illustrées sur des exemples de systèmes fortement corrélés.

RMN et calculs premiers-principes DFT :
application aux matériaux désordonnés et vitreux
Thibault CHARPENTIER

NIMBE, CEA, CNRS, Université Paris-Saclay, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette

La résonance magnétique nucléaire (RMN) du solide est aujourd'hui devenue un outil très puissant pour l'étude de la structure et dynamique de nombreux matériaux organiques ou inorganiques, qu'ils soient cristallins, désordonnés ou amorphes.¹ La large palette des méthodologies RMN mono- ou multidimensionnelle associée aux performances sans cesse croissantes des techniques associées permettent d'obtenir des informations très fines. Leur interprétation en terme de structure locale demande toutefois l'utilisation d'outils de modélisation avancée dont le calcul des paramètres RMN est une composante majeure.^{2,3} Dans le cadre de cet exposé, nous nous limiterons à la présentation de la méthode GIPAW basée sur le formalisme de la DFT par ondes planes et pseudopotentiels.⁴⁻⁷ Cette méthode est aujourd'hui incontournable et a largement démontré ses performances pour la prédiction de paramètres RMN en phase solide. Nous n'aborderons ici que les systèmes diamagnétiques et insisterons notamment sur les oxydes.

Dans un premier temps, nous présenterons les bases de la spectroscopie RMN du solide haute-résolution, les interactions RMN (tenseurs du gradient de champ électrique et déplacement chimique) et notamment sous quelle forme elles s'expriment dans les données expérimentales (spectres RMN et modélisation). Nous décrirons ensuite la méthode GIPAW pour le calcul DFT des paramètres RMN ainsi qu'un aperçu de la modélisation des spectres RMN. Nous discuterons des principaux facteurs influençant le calcul GIPAW et quelques approches (DFT+U) suggérées pour corriger les déficiences de la DFT dans certaines situations.^{8,9} Dans un dernier temps, nous présenterons des applications pour la modélisation des spectres RMN de verres d'oxydes et l'analyse poussée des liens entre la signature RMN et l'environnement local d'un atome.¹⁰⁻¹²

References

- (1) Edén, M. NMR Studies of Oxide-Based Glasses. *Annu. Rep. Prog. Chem., Sect. C: Phys. Chem.* **2012**, *108* (1), 177–221.
- (2) Bonhomme, C.; Gervais, C.; Babonneau, F.; Coelho, C.; Pourpoint, F.; Azaïs, T.; Ashbrook, S. E.; Griffin, J. M.; Yates, J. R.; Mauri, F.; et al. First-Principles Calculation of NMR Parameters Using the Gauge Including Projector Augmented Wave Method: A Chemist's Point of View. *Chem. Rev.* **2012**, *112* (11), 5733–5779.
- (3) Charpentier, T. The PAW/GIPAW Approach for Computing NMR Parameters: A New Dimension Added to NMR Study of Solids. *Solid State Nuclear Magnetic Resonance* **2011**, *40* (1), 1–20.
- (4) Pickard, C. J.; Mauri, F. All-Electron Magnetic Response with Pseudopotentials: NMR Chemical Shifts. *Phys. Rev. B* **2001**, *63* (24), 245101.
- (5) Yates, J. R.; Pickard, C. J.; Mauri, F. Calculation of NMR Chemical Shifts for Extended Systems Using Ultrasoft Pseudopotentials. *Phys. Rev. B* **2007**, *76* (2), 024401.
- (6) Joyce, S. A.; Yates, J. R.; Pickard, C. J.; Mauri, F. A First Principles Theory of Nuclear Magnetic Resonance J-Coupling in Solid-State Systems. *J. Chem. Phys.* **2007**, *127* (20), 204107.
- (7) Vasconcelos, F.; Wijs, G. A. de; Havenith, R. W. A.; Marsman, M.; Kresse, G. Finite-Field Implementation of NMR Chemical Shieldings for Molecules: Direct and Converse Gauge-Including Projector-Augmented-Wave Methods. *The Journal of Chemical Physics* **2013**, *139* (1), 014109.
- (8) Sadoc, A.; Body, M.; Legein, C.; Biswal, M.; Fayon, F.; Rocquefelte, X.; Boucher, F. NMR Parameters in Alkali, Alkaline Earth and Rare Earth Fluorides from First Principle Calculations. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, *13* (41), 18539–18550.
- (9) Profeta, M.; Benoit, M.; Mauri, F.; Pickard, C. J. First-Principles Calculation of the ¹⁷O NMR Parameters in Ca Oxide and Ca Aluminosilicates: The Partially Covalent Nature of the Ca–O Bond, a Challenge for Density Functional Theory. *Journal of the American Chemical Society* **2004**, *126* (39), 12628–12635.
- (10) Charpentier, T.; Kroll, P.; Mauri, F. First-Principles Nuclear Magnetic Resonance Structural Analysis of Vitreous Silica. *The Journal of Physical Chemistry C* **2009**, *113* (18), 7917–7929.
- (11) Gambuzzi, E.; Pedone, A.; Menziani, M. C.; Angeli, F.; Caurant, D.; Charpentier, T. Probing Silicon and Aluminium Chemical Environments in Silicate and Aluminosilicate Glasses by Solid State NMR Spectroscopy and Accurate First-Principles Calculations. *Geochimica et Cosmochimica Acta* **2014**, *125*, 170–185.
- (12) Charpentier, T.; Menziani, M. C.; Pedone, A. Computational Simulations of Solid State NMR Spectra: A New Era in Structure Determination of Oxide Glasses. *RSC Advances* **2013**, *3* (27), 10550.

Spectroscopies EELS : principes expérimentaux et modélisation DFT

Florent BOUCHER

Institut des Matériaux Jean Rouxel (IMN), CNRS, Université de Nantes

La spectroscopie de perte d'énergie des électrons, qui utilise un faisceau électronique pour sonder les matériaux, est généralement pratiquée dans un microscope électronique en transmission. Cela permet d'atteindre une résolution spatiale nanométrique voire, sous certaines conditions expérimentales, sub-nanométrique.

Dans le cas d'excitations d'électrons de cœur, transitions de haute énergie, l'EELS s'interprète en première approximation comme le XAS c'est-à-dire avec une sélectivité atomique et des règles de transitions dipolaires. L'EELS de cœurs permet alors d'obtenir des informations sur les degrés d'oxydation des éléments, la géométrie autour de l'atome sondé, l'évolution de la liaison chimique. Elle autorise aussi l'imagerie chimique avec une excellente résolution spatiale.

L'EELS de valence ou « Valence EELS », qui implique des transitions de basse énergie des électrons de valence vers la bande de conduction (< 100 eV), s'interprète de façon totalement différente car faisant appel à la notion de fonction diélectrique. Son utilisation est cependant pertinente pour l'étude des matériaux sensibles au faisceau électronique ou accéder à de l'information sur les états électroniques autour du niveau de Fermi.

Après avoir brièvement présenté les principes expérimentaux de l'EELS, nous montrerons comment les outils de la DFT peuvent être utilisés pour son interprétation. L'intérêt des mesures EELS et du couplage expérience/théorie sera illustré au travers de quelques exemples issus du laboratoire.

**Modélisation de paramètres RMN :
grands principes et applications aux systèmes paramagnétiques**

Florent BOUCHER

Institut des Matériaux Jean Rouxel (IMN), CNRS, Université de Nantes

La RMN est un outil de caractérisation incontournable en chimie des matériaux, très complémentaire de techniques comme la diffraction des rayons X car donnant accès à des informations comme l'ordre local autour des atomes sondés, la géométrie des sites, la force ou la typologie de la liaison chimique ou la proximité d'ions (para)magnétique. L'interprétation des paramètres RMN n'est cependant pas triviale et un recours aux outils de la modélisation peut être nécessaire.

Nous présenterons donc dans ce cours les grands principes de la modélisation des paramètres RMN sur des systèmes périodiques grâce aux outils de la DFT. Nous traiterons ainsi de la modélisation du tenseur de gradient de champ électrique et du tenseur de déplacement chimique mais aborderons aussi les aspects de modélisation du contact de Fermi qui concerne les phénomènes de déplacement de raies observés en présence d'ions paramagnétiques.

L'étude des systèmes paramagnétiques sera ainsi illustrée par des applications autour de la modélisation de paramètres RMN pour les matériaux de batterie, études qui ont permis d'élucider des phénomènes d'insertion du lithium dans des matériaux de positives des batteries Li-ion.

Marcelo Rozenberg
Laboratoire de Physique des Solides,
CNRS - Université Paris-Saclay

Matériaux à électrons fortement corrélés

Dans ce cours nous allons discuter l'origine des phénomènes des corrélations fortes dans des matériaux. Nous allons introduire des notions fondamentales, telles que l'effet Kondo, l'isolant de Mott, les bandes de Hubbard, etc. ainsi que les modèles de base, comme le modèle de l'impureté d'Anderson, le Hubbard, le périodique d'Anderson. Ensuite nous allons présenter des différentes propriétés et fonctionnalités des matériaux qu'on caractérise comme des systèmes fortement corrélés. Si le temps le permet, nous allons aussi décrire de façon plus détaillée un cas de figure intéressant : l'implémentation d'un neurone artificiel avec un isolant de Mott.

Magnétisme et couplage spin-orbite dans le solide

Xavier Rocquefelte

ISCR, CNRS – Université de Rennes 1, Rennes

Les matériaux magnétiques occupent une place primordiale dans la production et la distribution d'électricité, le fonctionnement des moteurs électriques, le stockage de données, l'imagerie médicale ... Au niveau microscopique, le magnétisme va se manifester de diverses manières, à travers l'état de spin d'un élément chimique, l'ordre magnétique à longue portée (ferromagnétique, antiferromagnétique, etc), l'anisotropie magnétique (axe de facile aimantation). Ces effets vont entraîner une modification de l'énergie du matériau allant de quelques électron-volts (eV) à quelques μeV . Durant ce cours nous allons aborder ces différents ordres de grandeurs du magnétisme et envisager leur modélisation théorique. En particulier, nous verrons comment déterminer les paramètres d'échange magnétique (J) et l'anisotropie magnéto-cristalline. Cela nous amènera à discuter des notions de frustration magnétique et de couplage spin-orbite. Un état des lieux des méthodes théoriques permettant de rendre compte de ces propriétés sera réalisé.

Prédiction de structures cristallines par algorithme évolutionnaire

par Gilles Frapper
IC2MP UMR 7285 Université de Poitiers - CNRS
gilles.frapper@univ-poitiers.fr

La détermination par simulation numérique d'une structure cristalline d'un composé à partir de l'unique connaissance de sa composition chimique est un défi majeur en Sciences de la Matière. En effet, l'exercice est loin d'être trivial : il s'agit d'identifier les arrangements structuraux de plus basse énergie, donc les plus stables thermodynamiquement, parmi des millions de structures possibles ! Illustrons ce défi : l'arrangement de vingt atomes dans une boîte –maille de répétition à la forme et au volume variables– peut générer *a priori* plus de 10^{21} structures. Imaginons qu'il faille 1h de temps de calcul pour déterminer numériquement l'énergie associée à chaque arrangement structural optimisé par une méthode de la chimie quantique, le temps de calcul nécessaire dépasserait l'âge de l'univers !

Rappelons que l'ensemble de ces énergies associées aux structures géométriques décrivent une surface d'énergie potentielle présentant des vallées, des sommets et des puits de différentes profondeurs ; ces derniers sont représentés en bleu intense à la Figure 1. La problématique est la suivante : comment accéder aux puits de plus basse énergie le rapidement possible, en monopolisant un minimum de ressource informatique et en trouvant le puit le plus profond (minimum global sur la PES) ?

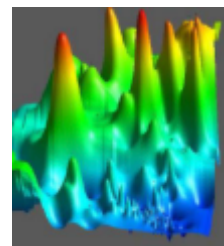


Figure 1 : surface d'énergie potentielle

Récemment, Artem R. Oganov et ses collaborateurs ont développé une méthode efficace et robuste pour localiser la région de plus basse énergie (code USPEX, mot qui signifie succès en russe)¹. Cet algorithme est basé sur les concepts de la théorie Darwinienne de l'évolution : un motif d'une structure cristalline générée aléatoirement peut s'associer à une brique élémentaire d'une seconde structure. Dès lors que ce nouvel arrangement est plus stable que ses « parents », il est autorisé « à se reproduire », c'est à dire à se combiner avec un autre motif d'une autre structure. Si cet arrangement est trop haut en énergie – donc instable énergétiquement –, il est tout simplement, et cruellement, écarté du cheptel des « reproducteurs potentiels ». Ainsi, de génération en génération, les meilleurs motifs présentant des liaisons stables entre atomes du réseau cristallin sont rapidement identifiés. Par cette approche auto-apprenante, le minimum global est atteint suite à l'optimisation de 1 000 à 3 000 structures cristallines – à comparer aux millions potentiellement existants pour un système contenant 20 atomes par maille !

Le design *in silico* - par simulation numérique - de nouveaux composés cristallins avec des topologies et propriétés physico-chimiques originales mais aussi de nanoparticules, de polymères et de surfaces fonctionnalisées semble désormais possible.

Ma lecture présentera succinctement les fondements conceptuels de cette méthode (R)évolutionnaire pour la détermination *in silico* de structures cristallines. Puis j'exposerai quelques applications récentes en sciences des matériaux développées dans mon groupe de recherche² et ailleurs. Au cours de cet exposé, j'évoquerai aussi l'intérêt d'étudier *in fine* la relation structure cristalline / propriété électronique par des approches propres aux chimistes théoriciens. L'objectif sera de susciter votre intérêt pour le champ d'étude « CSP, crystal structure prediction », aussi préparez vos exemples et communiquez-les-moi !

(1) USPEX <http://uspex-team.org/en/>

(2) a- JACS, 140, 413-422 (2018); b- PHYSICAL REVIEW MATERIALS, 1, 033607 (2017); c- J. PHYS. CHEM. C, 121, 11037-11046 (2017); d- J. PHYS. CHEM. C, 120, 11060-11067 (2016)

Liens entre structures atomique, chimique et électronique dans les matériaux et alliages métalliques

Christine Goyhenex

Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg, CNRS-Université de Strasbourg

Les propriétés électroniques et magnétiques des matériaux sont intimement reliées à leur structure atomique et chimique. Le couplage propriétés/structure est d'ailleurs réciproque c'est à dire que la structure atomique/chimique a bien évidemment une influence sur les propriétés du système mais réciproquement des détails de la structure électronique et magnétique peuvent être à l'origine de modifications de la structure atomique ou influencer sur la stabilité des matériaux. Nous illustrerons notre propos sur différents exemples choisis parmi les alliages métalliques et notamment les matériaux magnétiques. Nous décrivons les systèmes essentiellement à l'aide de modèles simples basés sur l'approximation des liaisons fortes ce qui nous permettra d'extraire plus aisément les tendances physiques.

**Importance de la contribution phononique dans les propriétés des matériaux :
application à IR, Raman, Conductivité optique**

Michiel van Setten

Université catholique de Louvain

Les mouvements des atomes influencent pratiquement toutes les propriétés de la matière condensée. Le calcul de ceux-ci nous donne accès aux propriétés thermodynamiques et aux spectres Raman et IR. Nous discuterons comment, en général, les vibrations du réseau sont calculées et quelles approximations doivent être faites en pratique.

En particulier, nous ferons attention à la différence entre le calcul des vibrations par une méthode directe, telles que les différences finies, et au moyen de la théorie de la fonctionnelle de la densité perturbée.

Puisque le calcul des propriétés vibrationnelles implique une grande quantité de calculs dont les résultats doivent être collectés et traités, nous passerons également du temps pour discuter des outils qui permettent d'effectuer ces calculs de manière automatisée.

Enfin, nous verrons à quel point le choix des fonctionnelles influence le spectre vibrationnel.

Calcul de propriétés optiques (Visible+UV)

Michiel van Setten

Université catholique de Louvain

Dans cet exposé, nous commencerons par donner un aperçu des processus résultant de l'interaction de la lumière avec la matière. Ensuite, nous discuterons comment connecter ces processus aux résultats de théories de champ moyen, en particulier à la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Nous discuterons des problèmes fondamentaux de cette description ainsi que les problèmes pratiques pouvant subvenir lors des calculs associés. De plus, nous regarderons plus spécifiquement les situations pour lesquelles cette approche s'effondre. En particulier, nous discuterons les problèmes fondamentaux du spectre obtenu à partir de Kohn-Sham et les problèmes qui trouvent leur origine dans l'outillage de théorie de champ moyen. Nous concluons avec une vue d'ensemble des méthodes qui peuvent être utilisées pour dépasser les limitations des méthodes en champ moyen.

Défauts ponctuels dans les solides : comment simuler leur énergie de formation ?

Camille LATOUCHE

Institut des Matériaux Jean Rouxel (IMN), Université de Nantes, CNRS, 2 rue de la Houssinière, BP 32229,
44322 Nantes Cedex 03, France
camille.latouche@univ-nantes.fr

Les propriétés opto-électroniques des matériaux proviennent fréquemment des défauts. Il est donc essentiel de comprendre finement les effets structuraux et énergétiques des défauts sur le matériau. Cependant, malgré les progrès technologiques et les outils expérimentaux contemporains, caractériser et identifier les défauts reste compliqué.

A l'inverse, les outils théoriques sont efficaces pour interpréter l'impact des défauts sur les propriétés du matériau et la simulation va servir de "super sonde" locale. La modélisation va permettre de calculer les énergies de formation des défauts, d'estimer leur concentration, de placer le niveau de Fermi en fonction de l'atmosphère de synthèse et de guider le raisonnement scientifique pour obtenir des dispositifs plus performants.¹⁻³ L'intérêt des calculs et de la symbiose théorie-expérience s'identifient donc aisément.

Dans ce cours, nous allons principalement discuter des défauts ponctuels en s'attardant sur l'origine de leur énergie de formation. Comment les calculer ? Quels sont les outils à notre disposition ? Comment lire une grille de résultats ? Pour répondre à ces questions, deux exemples récents de la littérature (CdIn_2S_4 et In_2S_3) seront utilisés.⁴⁻⁷

Crystals are like people: it is the
defects in them which tend to
make them interesting!

C. J. Humphreys

- [1] Lany, S.; Zunger, A. *Physical Review Letters* **2007**, *98*, 45501.
- [2] Lany, S.; Zunger, A. *Physical Review B* **2008**, *78*, 235104.
- [3] Freysoldt, C.; Grabowski, B.; Hickel, T.; Neugebauer, J.; Kresse, G.; Janotti, A.; Van de Walle, C. G. *Reviews of Modern Physics* **2014**, *86*, 253.
- [4] Péan, E. V.; Barreau, N.; Vidal, J.; Latouche, C.; Jobic, S. *Physical Review Materials* **2017**, *1*, 064605.
- [5] Péan, E.; Vidal, J.; Jobic, S.; Latouche, C. *Chemical Physics Letters* **2017**, *671*, 124.
- [6] Stolaroff, A.; Barreau, N.; Jobic, S.; Latouche, C. *Theoretical Chemistry Accounts* **2018**, *137*, 102.
- [7] Stolaroff, A.; Jobic, S.; Latouche, C. *Journal of Computational Chemistry* **2018**, *9999*, doi:10.1002/jcc.25543.

Isolants Topologiques

David Carpentier

CNRS - Ecole Normale Supérieure de Lyon

La Topologie est une branche des mathématiques qui étudie les propriétés d'objets divers indépendantes sous les déformations de ces objets. Elle permet d'identifier des propriétés, appelées invariants topologiques, qui caractérisent les objets que l'on peut déformer l'un dans l'autre. Des exemples de tels invariants sont le nombre d'enroulements d'une courbe autour d'un point, ou l'indice d'Euler des surfaces fermées. Dans le contexte de la matière condensée, la topologie a permis de caractériser les propriétés robustes de champs de vecteurs. Le premier exemple est celui des défauts dans une structure ordonnée, tel que les dislocations, disclinaisons ou vortex, décrits par un indice topologique. Plus récemment la topologie a permis de caractériser les isolants. Dans ces solides, le comportement électronique se déduit d'un ensemble de vecteurs dans un espace de Hilbert abstrait. Cet ensemble de vecteur peut acquérir des propriétés topologiques, donnant lieu à un nouveau type d'isolant appelé isolant topologique. Dans ce cours j'introduirai les outils généraux permettant de caractériser ces isolants topologiques. Je discuterai ensuite la manifestation de cette topologie sous la forme d'états métalliques à la surface de ces isolants et les propriétés physiques associées.

Surfaces et interfaces, effets de la dimensionnalité sur la structure électronique

Christine Goyhenex

Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg, CNRS-Université de Strasbourg

Les propriétés électroniques et magnétiques d'un matériau en volume (3D) peuvent différer très significativement de celles du même matériau sous forme de nanocristal (0D), nanofil (1D) ou de film mince ou à sa surface (2D). Nous monterons à l'aide de modèles simplifiés comment la densité d'état électronique locale varie avec la coordinence des atomes. De manière générale la largeur de la densité d'état décroît avec la coordinence (et la dimensionnalité) mais son amplitude augmente, ce qui a de nombreuses conséquences sur les propriétés du matériau. Nous discuterons également la notion d'états localisés à la surface (ou à l'interface). Outre la baisse du nombre de liaisons chimiques pour les atomes de surface la présence d'une surface brise également la symétrie et peut engendrer des comportements électroniques ou magnétiques nouveaux. Nous illustrerons notre propos par divers exemples caractéristiques.