



CYCLE DE CONFÉRENCES DE CHIMIE

*Avec le concours de : Université Clermont Auvergne
INP Clermont Auvergne*

Mardi 1^{er} juillet à 10 h

Amphi Rémi (site des Cézeaux)

Erwan ANDRE

Laboratoire de Chimie Physique et Microbiologie pour les Matériaux et l'Environnement, Nancy

Apports de la chimie numérique à l'étude des hydroxydes doubles lamellaires

Au cours des 50 dernières années, les avancées en chimie computationnelle ont permis de modéliser « *in silico* » des systèmes chimiques de plus en plus complexes, allant des atomes isolés en phase gazeuse aux matériaux hybrides et aux protéines. Parallèlement, il est désormais possible de simuler un nombre croissant de propriétés physico-chimiques.

Cette présentation offrira un panorama de ces applications en se concentrant sur les hydroxydes doubles lamellaires (HDL). Cette famille de matériaux se distingue par une richesse particulière en termes de composition, de structure, de dimensionalité et de domaines d'application.

Un accent particulier sera mis sur les méthodes actuellement les plus utilisées pour étudier les HDL, à savoir la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) en conditions périodiques, ainsi que la dynamique moléculaire (quantique ou classique). À travers divers exemples, nous illustrerons ce que ces méthodes permettent d'obtenir, leurs limites, et en particulier, nous mettrons en évidence la synergie entre théorie et expérimentation, notamment pour rationaliser les relations structure-propriétés.

La présentation se conclura par une ouverture prospective sur l'apport du machine learning dans ce domaine.

Over the past 50 years, advances in computational chemistry have enabled the "*in silico*" modeling of increasingly complex chemical systems, ranging from isolated atoms in the gas phase to hybrid materials and proteins. Concurrently, it has become possible to simulate an ever-growing number of physicochemical properties. This presentation will provide an overview of these applications, focusing on Layered Double Hydroxides (LDHs). This family of materials is particularly rich in terms of composition, structure, dimensionality, as well as in terms of application domains.

Special attention will be given to the methods currently most used to study LDHs, namely Density Functional Theory (DFT) under periodic conditions, as well as molecular dynamics (both quantum and classical). Through various examples, we will illustrate what these methods can achieve, their limitations, and, in particular, highlight the strength of the dialogue between theory and experiment, especially in rationalizing structure-property relationships.

The presentation will conclude with a forward-looking perspective on the contribution of machine learning to this field.

Coordinateurs : Alain DEQUIDT ☎ 33 473 407 194 courriel : alain.dequidt@uca.fr

Kévin LEMOINE ☎ 33 473 407 513 courriel : kevin.lemoine@uca.fr

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand (ICCF-UMR 6296)

Université Clermont Auvergne, 24, avenue Blaise Pascal, TSA 80026 63178 AUBIERE cedex-France