

Université de
Sherbrooke

Département de chimie CHM 506 – Chimie des matériaux

Plan d'activité pédagogique Automne 2024

Enseignant	Allison Wustrow
Courriel :	Allison.Wustrow@USherbrooke.ca
Local :	D1-2131
Téléphone :	+1 819 821-8000 x63044
Disponibilités :	À déterminer

Site web du cours : MS Teams

Horaire	Exposé magistral :	Lundi	13h30 à 15h20	salle D1-2120
		Jeudi	15h30 à 17h20	salle D1-2120

Description officielle de l'activité pédagogique¹

Cibles de formation :	Comprendre les origines atomiques et moléculaires des propriétés thermiques, électriques, magnétiques et mécaniques et la relation structure-propriétés pour différents types de matériaux.
Contenu :	Étude des principes de base des propriétés optiques, thermiques, électriques, magnétiques et mécaniques de plusieurs types de matériaux ayant une grande importance technologique, incluant métaux, semi-conducteurs, isolants, verre, cristaux, cristaux liquides, fullerènes, colloïdes et films Langmuir-Blodgett.
Crédits	3
Organisation	3 heures d'exposé magistral par semaine 6 heures de travail personnel par semaine
Particularités	Aucune

¹<https://www.usherbrooke.ca/admission/fiches-cours/chm506>

1 Présentation

Cette section présente les cibles de formation spécifiques et le contenu détaillé de l'activité pédagogique. Cette section, non modifiable sans l'approbation du comité de programme du Département de chimie, constitue la version officielle.

1.1 Mise en contexte

Ce cours de session 6 au baccalauréat ou session 2 à la maîtrise, dont CPH 317 est un préalable, est obligatoire dans le cheminement en chimie des matériaux et optionnel dans les autres cheminements. Il est le dernier cours en parallèle avec le projet phare en chimie des matériaux CHM601 et le cours de Développements en physico-chimie CPH600 de la série de cours en chimie physique. Bien qu'il ne soit pas officiellement un préalable, le cours CHM306 est l'introduction théorique à ce cours.

Ce cours, repart des bases de cristallographie et des propriétés des solides vues en CHM306 (les liens seront faits). Nous visons dans CHM506 non plus à décrire les phénomènes et les concepts d'un point de vue macroscopique mais à faire le lien entre la structure cristallographique et les principales propriétés électroniques, thermodynamiques, électriques, magnétiques, optoélectroniques et mécaniques de plusieurs types de matériaux parmi les métaux, semi-conducteurs, isolants, verres et cristaux.

Pour cela, nous partons des modèles théoriques vus dans la série de cours CPH315-316-317 (les liens seront faits) et nous en abordons de nouveaux avec lesquels la personne étudiante devra se familiariser. Ces modèles seront exploités pour déterminer les comportements ou calculer les propriétés ou paramètres des systèmes étudiés. Dans les cas où cela est possible, nous développerons les compétences pour choisir la meilleure méthode ou le meilleur modèle à utiliser.

1.2 Cibles de formation spécifiques

Le cours vise à introduire les théories permettant de passer de la structure cristalline, c'est-à-dire atomique et moléculaire des matériaux, aux modèles permettant de prédire les propriétés optiques, thermiques, électriques, et magnétiques de ceux-ci. Par ailleurs, l'introduction de ces modèles vise à comprendre les relations entre la structure des matériaux et leurs propriétés ainsi que l'influence des paramètres physiques sur celles-ci. Enfin, à l'issue de ce cours, toute personne devrait être familiarisée avec l'essentiel des concepts en lien avec les matériaux.

Concernant la cristallographie et les méthodes de diffraction :

- Définir les concepts en lien avec les systèmes cristallins
- Associer la structure cristalline aux conventions de notation
- Déduire à partir de mesures/analyses les paramètres cristallins dans des cas simples
- Choisir la méthode adéquate pour caractériser la structure d'un solide
- Comprendre les origines et effets des défauts dans les structures

Concernant les propriétés thermodynamiques :

- Définir les concepts associés à la lecture des diagrammes de phases ternaires
- Définir les concepts associés aux ordres et types de transition de phases
- Comprendre les conditions synthétiques pour les solides et comment les choisir dans les diagrammes de Ellingham et de Pourbaix

Concernant les propriétés électroniques :

- Expliquer les concepts permettant d'obtenir un diagramme de bandes et une densité d'états
- Exploiter les données d'un diagramme de bandes et déduire les propriétés d'un matériau
- Calculer la conductivité électrique (et thermique) d'un matériau
- Exploiter le théorème de Bloch en combinaison avec la symétrie des orbitales
- Définir les concepts en lien avec l'optique linéaire et non linéaire dans les solides
- Relier la structure cristalline aux concepts de piézoélectricité et ferroélectricité

- Comprendre l'origine des propriétés optiques dans un matériau

Concernant les propriétés magnétiques :

- Décrire l'origine du magnétisme dans les solides
- Exploiter les modèles théoriques pour calculer les propriétés magnétiques d'un matériau
- Associer le comportement magnétique d'un cristal à sa géométrie et à l'orientation des spins
- Comprendre les méthodes pour déterminer la structure magnétique d'un solide
- Décrire les propriétés des matériaux quantiques

2 Organisation

Cette section propre à l'approche pédagogique de chaque enseignante ou enseignant présente la méthode pédagogique, le calendrier, le barème et la procédure d'évaluation ainsi que l'échéancier des travaux. Cette section doit être cohérente avec le contenu de la section précédente.

2.1 Méthode pédagogique

Cours magistraux en présentiel uniquement. Combinaison de cours et exercices sur écran et sur tableau. Travail en classe en groupe et présentations orales. Le cours se divise en 4 thèmes : structure, thermodynamiques, propriétés opto-électroniques et propriétés magnétiques. Chaque thème sera complété par un devoir. Le travail en équipe est encouragé pour toutes activités sauf que les examens.

2.2 Calendrier

Semaine	Date	Thème	Sujets	Devoirs	Minitest	Lectures
1	2024-08-26		Introduction			
2	2024-09-02		La symétrie			Woodward 1.1, Appendix A + B
3	2024-09-09		Les structures idéales			Woodward 1.4, 1.5
4	2024-09-16		Les structures réales	Remise Devoir 1		Woodward 2, 3.1
5	2024-09-23		Microstructure et diagrammes de phase			Woodward 4.1-4.3
6	2024-09-30		Solides en transformation			Woodward 4.4, 4.5
7	2024-10-07		Introduction à conductivité	Remise Devoir 2		Woodward 10.1, 10.2,
8	2024-10-14	Examen périodique				
9	2024-10-21	Relâche				
10	2024-10-28		La structure électronique			Woodward 6.1, 6.2, 6.4
11	2024-11-04		La structure électronique			Woodward 6.3, 10.3, 10.4
12	2024-11-11		Les propriétés optiques et thermiques	Remise Devoir 3		Woodward 4.4.6,7,8,
13	2024-11-18		Magnétisme			Woodward 13.7, 13.8, 9
14	2024-11-25		Les matériaux quantiques	Remise Devoir 4		Woodward 9.11,6.5, 11
15	2024-12-02	Minitest	Minitest (lundi) Présentations Finales (jeudi)		Remise Minitest	
16	2024-12-09		Présentations Finales (jeudi)			
17	2024-12-16	Examen final	Présentations Finales			

2.2.1 Dates importantes

- Date limite de modification des activités pédagogiques : 2024-09-15
- Date limite de retrait de la procédure de stage : 2024-09-21
- Date limite d'abandon des cours sans mention d'échec : 2024-11-15
- Journées de congé dans la session :
 - Activités étudiantes : 2024-08-29
 - Fête du Travail : 2024-09-02
 - Journée nationale de la vérité et de la réconciliation : 2024-09-27
 - Action de grâces : 2024-10-14

2.3 Évaluation

Devoirs (4)	20 %		
Participation	10 %		
Minitest	15 %		
Présentation Finale	25 %		
Examen intra	30 %	Non spécifié	1 h 50

L'intra (structure + thermo) et le minitest (structure électronique et magnétique) seront 'open google' - c'est à dire que vous aurez accès à vos notes mais aussi à l'internet. La présentation finale seront fait en groupes de 2 sur les applications des matériaux inorganiques. Participation est basé sur les worksheets fait en classe.

2.3.1 Qualité de la langue et de la présentation

Conformément à l'article 17 du règlement facultaire d'évaluation des apprentissages² l'enseignante ou l'enseignant peut retourner à l'étudiante ou à l'étudiant tout travail non conforme aux exigences quant à la qualité de la langue et aux normes de présentation.

2.3.2 Plagiat

Le plagiat consiste à utiliser des résultats obtenus par d'autres personnes afin de les faire passer pour sien et dans le dessein de tromper l'enseignante ou l'enseignant. Vous trouverez en annexe un document d'information relatif à l'intégrité intellectuelle qui fait état de l'article 9.4.1 du Règlement des études³. Lors de la correction de tout travail individuel ou de groupe une attention spéciale sera portée au plagiat. Si une preuve de plagiat est attestée, elle sera traitée en conformité, entre autres, avec l'article 9.4.1 du Règlement des études de l'Université de Sherbrooke. L'étudiante ou l'étudiant peut s'exposer à de graves sanctions qui peuvent être soit l'attribution de la note E ou de la note zéro (0) pour un travail, un examen ou une activité évaluée, soit de reprendre un travail, un examen ou une activité pédagogique. Tout travail suspecté de plagiat sera transmis au Secrétaire de la Faculté des sciences. Ceci n'indique pas que vous n'avez pas le droit de coopérer entre deux équipes, tant que la rédaction finale des documents et la création du programme restent le fait de votre équipe. En cas de doute de plagiat, l'enseignante ou l'enseignant peut demander à l'équipe d'expliquer les notions ou le fonctionnement du code qu'elle ou qu'il considère comme étant plagié. En cas d'incertitude, ne pas hésiter à demander conseil et assistance à l'enseignante ou l'enseignant afin d'éviter toute situation délicate par la suite.

2.4 Échéancier des travaux

Devoirs	Sujet	Réception	Remise	Points
Devoir 2	Le Thermodynamiques	À définir	2024-10-10	5
Devoir 3	La structure électronique	À définir	2024-11-14	5
Devoir 4	Les propriétés fonctionnels	À définir	2024-11-28	5
Devoir 1	La structure	À définir	2024-09-19	5

2.5 Utilisation d'appareils électroniques et du courriel

Selon le règlement complémentaire des études, section 4.2.3⁴, l'utilisation d'ordinateurs, de cellulaires ou de tablettes pendant une prestation est interdite à condition que leur usage soit explicitement permise dans le plan de cours.

Dans ce cours, l'usage de téléphones cellulaires, de tablettes ou d'ordinateurs est autorisées. Cette permission peut être retirée en tout temps si leur usage entraîne des abus.

²https://www.usherbrooke.ca/sciences/fileadmin/sites/sciences/documents/Etudiants_actuels/Informations_academiques_et_reglements/2017-10-27_Reglement_facultaire_-_evaluation_des_apprentissages.pdf

³<https://www.usherbrooke.ca/registraire/droits-et-responsabilites/reglement-des-etudes/>

⁴https://www.usherbrooke.ca/sciences/fileadmin/sites/sciences/documents/Etudiants_actuels/Informations_academiques_et_reglements/Sciences_Reglement_complementaire.pdf

Tel qu'indiqué dans le règlement universitaire des études, section 4.2.3⁵, toute utilisation d'appareils de captation de la voix ou de l'image exige la permission de la personne enseignante.

Note : Je réponds aux questions posées par courriel à l'extérieur des périodes de cours.

3 Matériel nécessaire pour l'activité pédagogique

Le texte principal du cours est :

- Solid State Materials Chemistry de Patrick M. Woodward, Pavel Karen, John S. O. Evans et Thomas Vogt. ISBN 978-0-521-87325-3

Le livre suivant peut aussi être utile pour le magnétisme

- Magnetic Materials de Nicola A. Spaldin. ISBN 978-0-521-88669-7

On utilisera des outils gratuits sur internet, dont :

- VESTA crystal structure drawing package <http://jp-minerals.org/vesta/en/download.html>
- Crystallography Open Database <http://www.crystallography.net>
- Materials Project <https://next-gen.materialsproject.org/>

4 Références

- [1] ASHCROFT, N. W. AND MERMIN, N. D. : *Solid State Physics*. Holt-Saunders, 1976.
- [2] COTTON, F ALBERT : *Chemical applications of group theory*. John Wiley & Sons, 1991.
- [3] KITTEL, CHARLES : *Introduction to solid state physics*. John Wiley & sons, inc, 2005.
- [4] SPALDIN, NICOLA A : *Magnetic materials : fundamentals and applications*. Cambridge university press, 2010.
- [5] WELLS, ALEXANDER FRANK : *Structural inorganic chemistry*. Oxford Classic Texts in the Ph, 2012.
- [6] WEST, ANTHONY R : *Solid state chemistry and its applications*. John Wiley & Sons, 2022.
- [7] WOODWARD, PATRICK M AND KAREN, PAVEL AND EVANS, JOHN SO AND VOGT, THOMAS : *Solid state materials chemistry*. Cambridge University Press, 2021.

⁵<https://www.usherbrooke.ca/registraire/droits-et-responsabilites/reglement-des-etudes/>

L'intégrité intellectuelle passe, notamment, par la reconnaissance des sources utilisées. À l'Université de Sherbrooke, on y veille!

Extrait du Règlement des études (Règlement 2575-009)

9.4.1 DÉLITS RELATIFS AUX ÉTUDES

Un délit relatif aux études désigne tout acte trompeur ou toute tentative de commettre un tel acte, quant au rendement scolaire ou une exigence relative à une activité pédagogique, à un programme ou à un parcours libre.

Sont notamment considérés comme un délit relatif aux études les faits suivants :

- a) commettre un plagiat, soit faire passer ou tenter de faire passer pour sien, dans une production évaluée, le travail d'une autre personne ou des passages ou des idées tirés de l'œuvre d'autrui (ce qui inclut notamment le fait de ne pas indiquer la source d'une production, d'un passage ou d'une idée tirée de l'œuvre d'autrui);
 - b) commettre un autoplagiat, soit soumettre, sans autorisation préalable, une même production, en tout ou en partie, à plus d'une activité pédagogique ou dans une même activité pédagogique (notamment en cas de reprise);
 - c) usurper l'identité d'une autre personne ou procéder à une substitution de personne lors d'une production évaluée ou de toute autre prestation obligatoire;
 - d) fournir ou obtenir toute aide non autorisée, qu'elle soit collective ou individuelle, pour une production faisant l'objet d'une évaluation;
 - e) obtenir par vol ou toute autre manœuvre frauduleuse, posséder ou utiliser du matériel de toute forme (incluant le numérique) non autorisé avant ou pendant une production faisant l'objet d'une évaluation;
 - f) copier, contrefaire ou falsifier un document pour l'évaluation d'une activité pédagogique;
- [...]

Par plagiat, on entend notamment :

- Copier intégralement une phrase ou un passage d'un livre, d'un article de journal ou de revue, d'une page Web ou de tout autre document en omettant d'en mentionner la source ou de le mettre entre guillemets;
- reproduire des présentations, des dessins, des photographies, des graphiques, des données... sans en préciser la provenance et, dans certains cas, sans en avoir obtenu la permission de reproduire;
- utiliser, en tout ou en partie, du matériel sonore, graphique ou visuel, des pages Internet, du code de programme informatique ou des éléments de logiciel, des données ou résultats d'expérimentation ou toute autre information en provenance d'autrui en le faisant passer pour sien ou sans en citer les sources;
- résumer ou paraphraser l'idée d'un auteur sans en indiquer la source;
- traduire en partie ou en totalité un texte en omettant d'en mentionner la source ou de le mettre entre guillemets ;
- utiliser le travail d'un autre et le présenter comme sien (et ce, même si cette personne a donné son accord);
- acheter un travail sur le Web ou ailleurs et le faire passer pour sien;
- utiliser sans autorisation le même travail pour deux activités différentes (autoplagiat).

Autrement dit : mentionnez vos sources
