

Calculs théoriques des déplacements Chimiques

Jean-François Paul

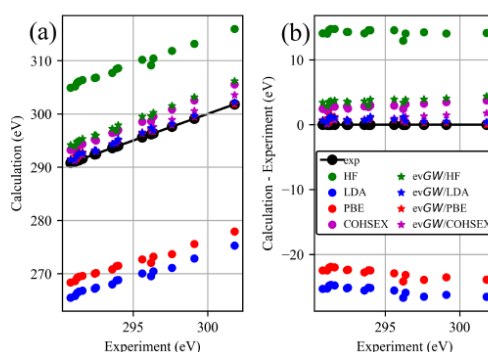
Unité de Catalyse et Chimie de Solide, UMR 8181 CNRS, Université de Lille

Contact: jean-francois.paul@univ-lille.fr

Résumé

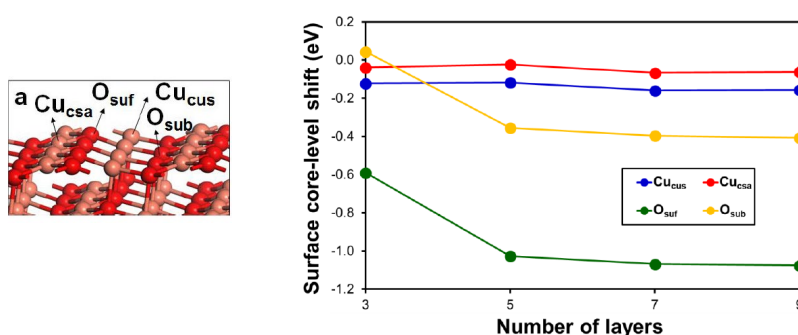
L'attribution des spectres XPS se fait généralement par l'utilisation de **tables** et par **comparaison** avec les spectres de composés de référence, ce qui permet la détermination *a minima* du nombre d'oxydation des éléments étudiés. L'interprétation peut cependant devenir plus difficile si les spectres de référence ne sont pas disponibles, comme c'est le cas, par exemple, pour l'évaluation des effets de surface ou des effets environnementaux. Le calcul théorique des déplacements XPS peut alors représenter une alternative pour affiner les interprétations.

En fonction des systèmes étudiés, plusieurs méthodes sont disponibles. Dans le cas des systèmes moléculaires ou modélisables par un système de petite taille, les calculs d'états excités sont possibles et donnent accès, à la fois, aux déplacements chimiques de manière absolue et aux intensités relatives des différentes transitions.



Comparaison théorie-expérience pour le déplacement chimique du C(1s) pour un ensemble de molécules organiques (1)

Pour les solides, les calculs des déplacements chimiques absolus restent complexes, mais il est possible, en utilisant la méthode consistant à faire varier le nombre d'électrons du système de manière continue, d'obtenir les positions relatives des signaux pour un même élément chimique.



Déplacement chimique relatif des oxygènes de surface (2)

Dans tous les cas, une étude théorique peut grandement faciliter l'analyse des données expérimentales, à condition que le modèle utilisé soit effectivement représentatif du système réel.

Références

1. Mukatayev I., Moevus F., Sklénard B., Olevano V. et Li J., arXiv :220808335v1
2. Trinh Q. T., Bhola, K., Amaniampong P. N. Jérôme F. Mushrif S. J. Phys. Chem. C 2018, 122, 22397–22406)