

Pôle CAPT - Recherche

Chimie Analytique, Physique et Théorique

Animateurs:

Sandra MOUNICOU (CR,
CNRS) et Panos KARAMANIS
(CR, CNRS)

Actualité

Recherche

Projets structurants

Publications scientifiques

Membres

COMPÉTENCES



Chimie
quantique,
dynamique
moléculaire
et calcul
scientifique

Réactivité
chimique
en phase
gazeuse
et aux
surfaces/
interfaces



Caractérisation
d'espèces
chimiques
à courte
durée de
vie



Isotopie /
Spéciation



Spectroscopies
couplées /

**Domaines
d'application**

Énergie: Optimisation
des énergies
carbonées et
nouvelles stratégies
énergétiques

Environnement :
diagnostic, cycle
biogéochimique et
remédiation

Vivant : Réponse du
vivant et mécanisme
d'écotoxicité

Caractérisation
des
surfaces,
interfaces

Agroalimentaire :
traçabilité



Stratégies
séparatives /
Imagerie
chimique
2D/3D



Electrochimie

Objectif :

Observation, caractérisation et compréhension des mécanismes primaires qui régissent les comportements physico-chimiques de la matière à différentes échelles : isotope, atome, molécule, agrégats, macromolécules, nano-objets, surfaces et interfaces

- * Implémentation d'algorithmes en chimie quantique et dynamique moléculaire permettant la mise en œuvre de stratégies calculatoires multi-échelles efficaces
- * Couplage de techniques de pointe : méthodes séparatives/identification par spectrométrie de masse
- * Visualisation et imagerie de la réactivité chimique à différentes échelles
- * Etudes couplant expérimentation et modélisation focalisées la cartographie de systèmes complexes et la réactivité chimique en phase gaz et aux interfaces.