



UNIVERSITÉ
PARIS-EST
MARNE-LA-VALLÉE



La recherche en Chimie à l'UPEM

Sommaire

- 1 • Les chimistes à l'UPEM
- 2 • Activités et thématiques de recherche
- 3 • Modèles et validation
- 4 • Illustrations

Les chimistes à l'UPEM

ifsa INSTITUT FRANCIEN
DES SCIENCES APPLIQUÉES

MSME
Laboratoire Modélisation
et Simulation Multi Echelle

UMR 8208 (UPEM-UPEC-CNRS)

Equipe Chimie Théorique

LGE LABORATOIRE
GÉOMATÉRIAUX ET
ENVIRONNEMENT
Marne-la-Vallée

EA 4508 (UPEM)

- Une quinzaine de permanents (E et EC) + Chaire Blaise Pascal (UPE, IDF)
- Une dizaine de post-doctorants (ATER, Post-Docs)
- Une vingtaine de doctorants (ED SIE, Cotutelles, Co-directions)
- > 10 chercheurs invités/an (UPE, UPEM, CNRS, Contrats, ...)
- Collaborations UPE: LISIS (IFSTTAR), I. Navier (IFSTTAR, ENPC), CERMICS (ENPC), ICMPE (UPEC, CNRS), LISA (UPD, UPEC, CNRS)
- Investissement d'avenir: LABEX MMCD
- Collaborations avec > 10 labos en France (ANRs, > 5 GDRs CNRS, Programmes thématiques, contrats industriels ...), Société Chimique de France
- Collaborations avec > 20 pays (2 projets H2020, 1 GDRI, Contrats bilatéraux, CECAM ...)
- Formations: Licence « Physique, Chimie » (~15-20 étudiants/an en L3) (UPEM); Master « Chimie » (UPEM-UPEC) (1 M1 (~80 étudiants/an) et 4 parcours M2 (~20 étudiants/an/ parcours). Intervenants: UPEM, UPEC, IFSTTAR, Industriels...

Activités de Recherche

- Etudes fondamentales et applicatives
- Etudes à l'échelle microscopique et multi-échelles
- Interface théorie-Expérience
- Etudes expérimentales
- Prédications des propriétés structurales, spectroscopiques, thermodynamiques
- Caractérisation, identification et réactivité

Thématiques de Recherche

- Astrochimie, astrophysique, chimie prébiotique
- Physico-chimie atmosphérique et planétaire
- Applications environnementales: **Capture et séquestration spécifiques des gaz** (e.g. effet de serre, polluants, ...), Dépollution de l'eau
- Applications dans le domaine de l'énergie (**piézoélectricité**), microfluidique
- Applications biologiques: Neurotransmetteurs, Bioluminescence, Phytochromes, Olfaction
- Synthèse de matériaux

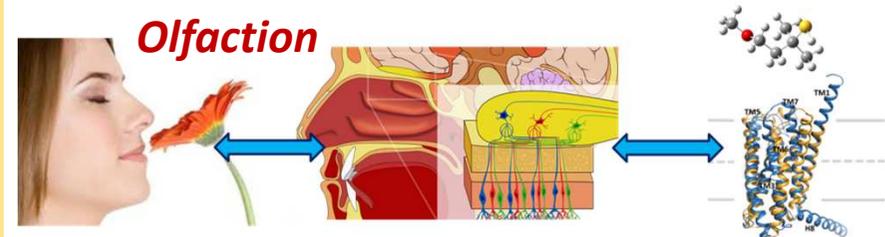
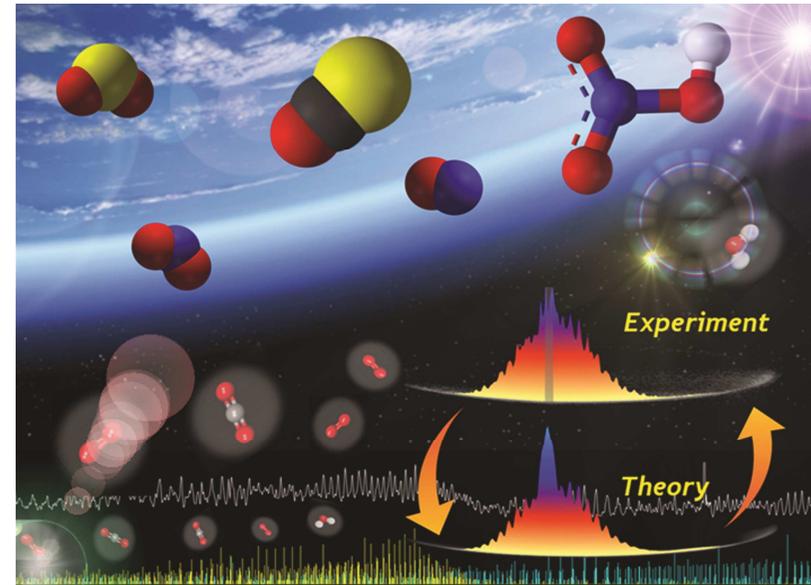


Illustration 1: Etudes multi-échelles et validation des modèles

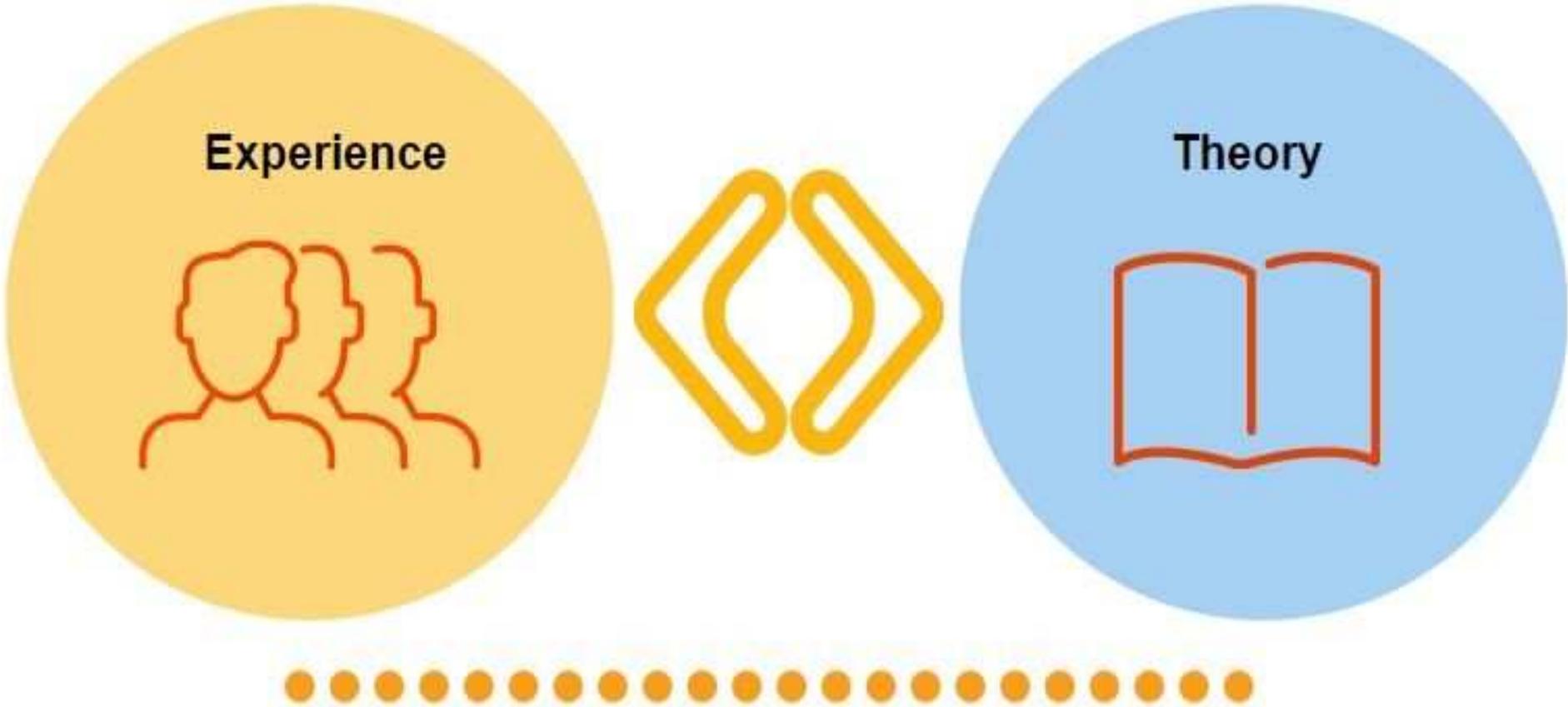
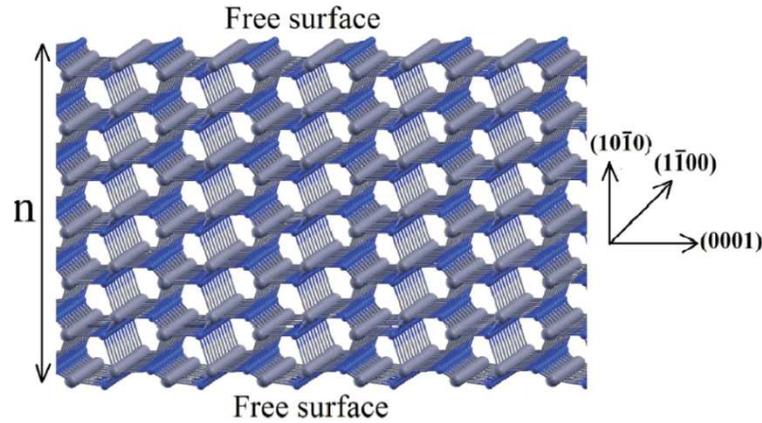
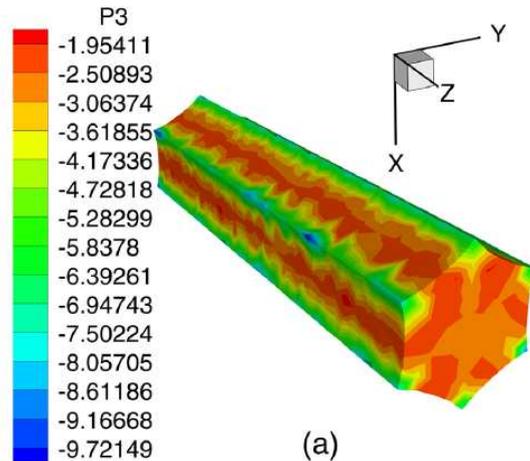


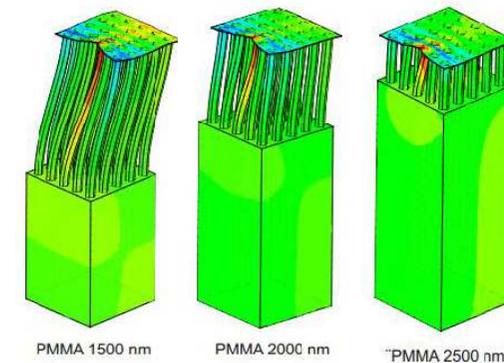
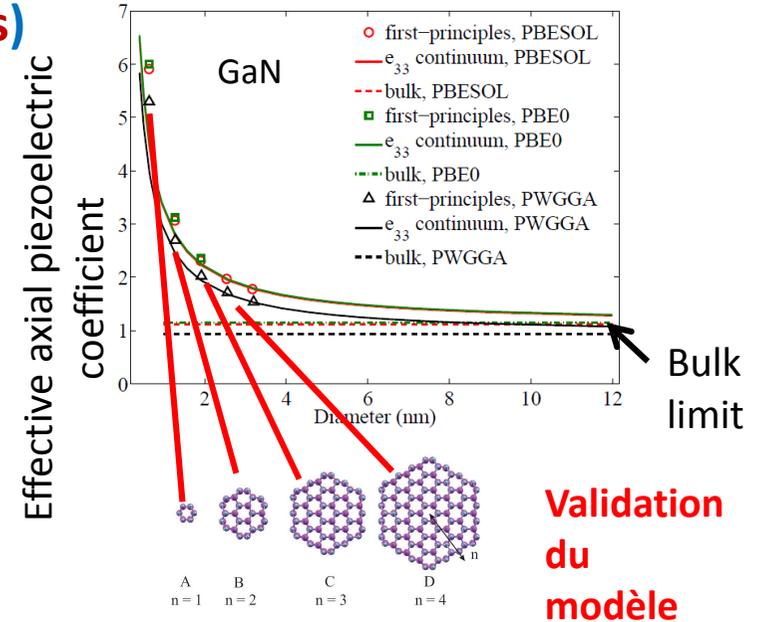
Illustration 2: Etudes multi-échelles de la Piézoélectricité; Construction de modèles multi échelles de nanostructures combinant calculs *ab initio* et mécanique des milieux continus (UPEM: Chimistes+Mécaniciens)



Calculs *ab initio* pour identification des paramètres continus

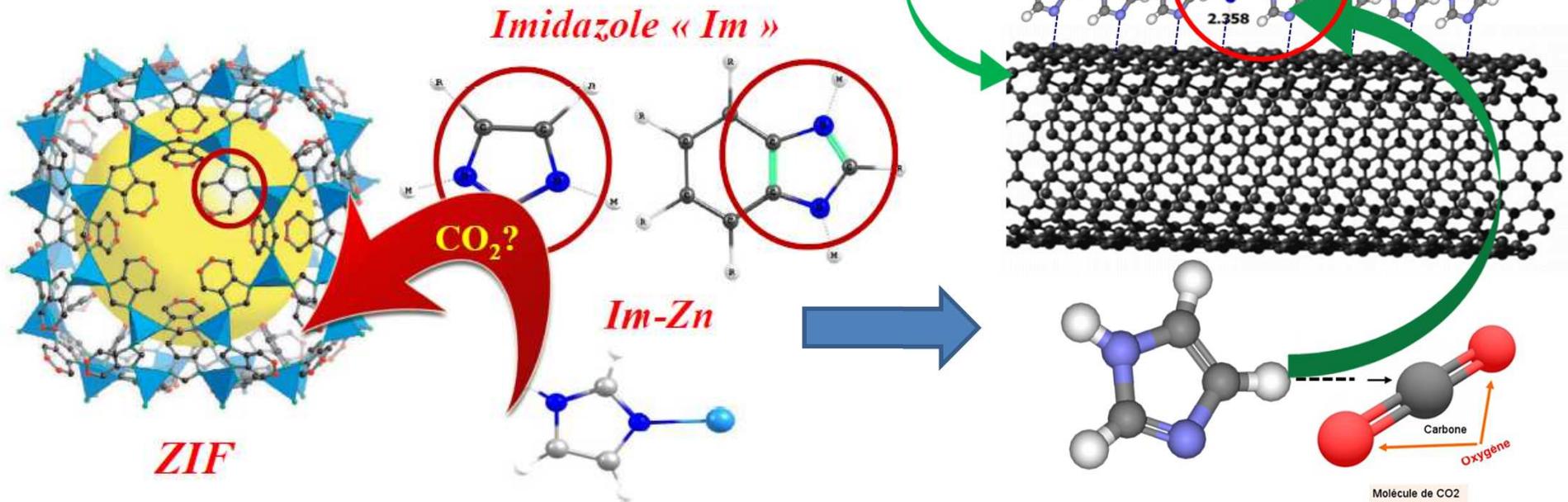


Modèle continu de nanofils incluant des effets de tailles



Modélisation de systèmes de récupération d'énergie à base de nanofils

Illustration 3: Capture et séquestration de CO₂ par les ZIFs l'échelle microscopique (Projet H2020 +UPE+ UPEM+CNRS+Labex MMCD+Arabie Saudite+Inde)





CONTACT

MAJDI HOCHLAF,
 Enseignant-Chercheur UPEM
 00 +33 (0)1 60 95 73 19
 majdi.hochlaf@u-pem.fr



Merci pour votre attention