

**Structure du programme et liste des cours****Doctorat en sciences de l'énergie et des matériaux****(Cheminement: 1)**

À moins d'indication contraire, un cours comporte trois (3) crédits

**Cours obligatoires (7 crédits)**

L'étudiant doit compléter les cours suivants (7 crédits):

**NRG8801 - Examen doctoral (6 crédits)**

L'objectif principal de l'examen doctoral est de vérifier d'une part, si le projet de recherche de l'étudiant a été suffisamment bien défini et, d'autre part, si l'étudiant a la préparation suffisante pour mener à bien son projet. Il pourra, par la même occasion, tirer profit de recommandations susceptibles de favoriser la progression de ses travaux. Il est invité à présenter par écrit et à défendre oralement devant jury sa problématique de recherche.

L'activité est évaluée à l'aide des mentions "S" (succès) et "E" (échec).

**NRG9205 - Séminaire de doctorat (1 crédit)**

Présentation de sujets d'actualité dans les sciences de l'énergie et des matériaux par des étudiants, dans le cadre des séminaires du Centre.

L'activité est évaluée à l'aide des mentions "S" (succès) et "E" (échec).

**Cours optionnels (6 crédits)**

L'étudiant choisit 2 cours parmi les suivants (6 crédits):

**CAN6001 - Analyse chimique (1 crédit)**

Introduction aux quatre grands champs de la chimie analytique (analyse qualitative, analyse quantitative, identification et séparation des composantes), appliqués à l'analyse des propriétés des matériaux lignocellulosiques et de leurs dérivés. Survol des techniques de base en analyse chimique et introduction aux méthodes d'analyse spécifiques aux matériaux lignocellulosiques incluant les analyses papetières. Étude approfondie des techniques ne faisant pas l'objet de cours au premier cycle : microscopie électronique, analyse thermogravimétrique, analyse d'angles de contact, spectroscopie des photoélectrons induits par absorption de rayons X, analyse de la structure moléculaire par RMN 1 D et 2D, imagerie par spectroscopie infra-rouge, couplage de méthodes etc. Cas pratiques reliés aux projets de recherche des étudiants.

**CHM6005 - Polluants industriels et environnement (1 crédit)**

Étude des principaux polluants et de leurs effets sur l'environnement.

Principaux polluants de l'air, des eaux et du sol. Action des pesticides. Détermination des sources. Processus industriels ou autres responsables des contaminations de l'environnement. Structure chimique des contrôles : contrôle, décomposition ou neutralisation des contaminants. Effets destructifs des polluants sur le vivant.

### **CHM6007 - Chimie des matériaux cellulosiques (1 crédit)**

Sources de cellulose, secteurs d'utilisations, cellulose, structure moléculaire et supramoléculaire de la cellulose, propriétés, réactions de la cellulose, principaux dérivés cellulosiques, hémicelluloses, propriétés, réactions des hémicelluloses, produits issus d'hémicelluloses, lignine, propriétés, délignification, blanchiment, produits chimiques et polymères à base de lignine, distribution et contribution des matières extractibles dans les végétaux, mode d'extraction, potentialités d'utilisation. Composition et formation du bois, de la fibre agricole, de l'écorce et formation de la fibre. Matériaux composites à base de cellulose, processus de fabrication, secteurs d'utilisations.

### **CHM6008 - Bioraffinage (1 crédit)**

Introduire aux étudiants les possibilités du bioraffinage et les défis à relever dans ce secteur émergent.

Thèmes abordés :

Principes du bioraffinage, bioraffinerie basée sur des matières lignocellulosiques, approvisionnement en matières lignocellulosiques, procédés thermo-chimiques pour le bioraffinage, enzymes pour le bioraffinage, notions de microbiologie industrielle adaptées au bioraffinage, production d'éthanol cellulosique et autres biocarburants existants ou à venir, production de bioplastiques bactériens et autres bioproduits microbiens utilisables sur place ou commercialisables, stratégies retenues, récents développements, histoire de succès et tendances dans le bioraffinage.

### **ENG6004 - L'hydrogène comme vecteur énergétique (1 crédit)**

Objectifs : Se familiariser avec certains aspects de l'hydrogène comme vecteur énergétique. Prendre connaissance des divers modes de production, de distribution et de stockage de l'hydrogène. S'initier à divers aspects liés à la sécurité de l'hydrogène.

Contenu : Propriétés physiques et chimiques de l'hydrogène. Introduction aux divers modes de production de l'hydrogène : reformage, extraction de la biomasse, électrolyse. Initiation aux principaux modes de stockage de l'hydrogène : compression, liquéfaction, stockage sur matériaux. Méthodes de distribution de l'hydrogène. Rôles de l'hydrogène. L'hydrogène et le système énergétique. Hydrogènes et batteries. Utilisation sécuritaire de l'hydrogène.

### **ENG6005 - Piles à combustibles et électrolyseurs (1 crédit)**

Ce cours portera sur l'étude de la pile à combustible et de l'électrolyseur à électrolyte de polymère (types PEMFC et PEME), les matériaux, les composants et les méthodes de caractérisation. L'étudiant sera amené à comprendre comment fonctionne une PEMFC et un PEME, à connaître les matériaux qui les composent ainsi que les problèmes qui leur sont reliés.

### **ENG6006 - Hydrogène et métaux (1 crédit)**

Ce cours porte sur les différentes interactions entre l'hydrogène et les métaux. Plus spécifiquement : les hydrures métalliques, la fragilisation par l'hydrogène, les interactions entre l'hydrogène et les catalyseurs, la diffusion de l'hydrogène, les propriétés de surface, propriétés magnétiques et supraconductivité. Les aspects théoriques (théorie quantique, thermodynamique, élasticité) seront considérés ainsi que les techniques expérimentales. Les sujets seront établis en fonction de l'auditoire.

### **NRG6000 - Science des matériaux (1 crédit)**

Présenter une vue d'ensemble de la physique et la chimie des matériaux. Structure atomique. Défauts et diffusion. Solidification. Propriétés mécaniques. Diagrammes de phase. Transformation de phases et modification des propriétés mécaniques. Modification des propriétés de surface.

### **NRG6001 - Énergie et systèmes énergétiques (1 crédit)**

Ce cours donnera une vue d'ensemble des problématiques et des technologies qui influencent le contexte énergétique. Contexte national et international. Efficacité énergétique. Technologies de demande par secteur (résidentiel, commercial, industriel, transport), par usage (chauffage, éclairage, moteur, etc.) et technologies d'offres conventionnelles (hydroélectricité, centrales thermiques, etc.). Les énergies renouvelables solaire, éolienne, fusion, etc. Les relations énergie-environnement.

### **NRG7703 - Problèmes spéciaux III (1 crédit)**

Ce cours, offert généralement sous forme de lectures dirigées, sert à donner à l'étudiant un complément de formation dans certains domaines jugés nécessaires par le Comité de programmes.

### **NRG9213 - Structure et propriétés des matériaux (1 crédit)**

Présenter une vue d'ensemble des matériaux et particulièrement de l'influence des formes variées de structures sur leurs propriétés.

Types de liaisons. Structure cristalline. Défauts et diffusion. Élasticité, plasticité et ténacité. Phases et diagramme d'équilibre. Transformation de phases et modification des propriétés mécaniques. Théorie des bandes. Métaux, semi-conducteurs et isolants. Polymères. Céramiques. Matériaux composites. Elaboration des films minces. Modification des propriétés de surface. Visite d'installations de mise en forme des diverses classes de matériaux.

### **PHQ6001 - Electrodynamique (1 crédit)**

Formulation covariante de l'électrodynamique. Tenseur d'énergie-impulsion. Problèmes aux limites et fonctions de Green. Magnétohydrodynamique et plasmas. Potentiels de Liénard-Wiechert et rayonnement. Méthodes numériques utilisées en électrodynamique.

### **PHQ6003 - Physique statistique avancée (1 crédit)**

Approfondir la compréhension de la physique statistique et l'utiliser dans des applications modernes. Les sujets traités seront choisis parmi les suivants : fondements de la physique statistique : ensembles et fluctuations. Transitions de phase : transitions du premier et du deuxième ordre, approche du champ moyen, notion d'universalité et groupe de renormalisation. Modèles de Ising et de Potts. Physique statistique hors d'équilibre. Théorie cinétique des gaz. Hiérarchie BBGKY. Équation de Boltzmann. Diffusion. Propriétés de transport. Méthode de théorie des champs en physique statistique.

### **PHQ6008 - Physique mathématique (1 crédit)**

Viser à compléter la formation de base de l'étudiant en ce qui a trait aux méthodes mathématiques utilisées en physique. Approfondir quelques-uns des sujets suivants: équations différentielles et fonctions de Green. Variables complexes. Fonctions spéciales. Équations différentielles non linéaires. Selon la préparation des étudiants et de leurs champs de spécialisation, la théorie des groupes, théorie des distributions et la géométrie différentielle seront également au programme.

### **PHQ6012 - Équations d'état (1 crédit)**

Introduction et développement historique. Fondements théoriques. Forces intermoléculaires et coefficients viriels. Phénomènes critiques. Méthodes expérimentales. Applications: facteur de compressibilité et absorption.

### **PHQ6013 - Analyse et réduction de données (1 crédit)**

Distribution statistique. Propagation et estimé d'incertitudes. Méthode des moindres carrés. Régression linéaire, polynomiale, multiple. Test khi-carré. Lissage, interpolation, extrapolation. Échantillonnage. Transformée de Fourier discrète.

### **PMO6003 - Physique atomique et moléculaire (1 crédit)**

Atomes à plusieurs électrons: les diverses approximations. Les molécules simples. La liaison chimique: covalente et ionique. Liaisons non localisées; la liaison métallique. Agrégats macroscopiques d'atomes. Théorie des collisions: approximation de Born, méthode des ondes partielles, applications. Absorption. Potentiels intermoléculaires aux énergies thermiques.

### **PMO6007 - État solide (1 crédit)**

Structure cristalline, constantes élastiques et ondes élastiques, phonons et vibrations d'un réseau. Propriétés thermiques d'isolants, gaz de Fermi, bande d'énergie, cristaux semi-conducteurs, superconductivité. Propriétés diélectriques. Propriétés magnétiques.

### **PMO6009 - Synthèse et caractérisation des matériaux (1 crédit)**

Approfondir les connaissances en matière de caractérisation et de synthèse de matériaux, particulièrement les nanomatériaux. Effet de la nanostructure sur les propriétés des matériaux. Concepts de phase cristalline, abondance de phases, grosseur de cristallites, orientation préférentielle. Méthodes de synthèse et de contrôle de la microstructure. Caractérisation des matériaux (cristallographique, chimique et morphologique). Préparation d'échantillons et analyse de résultats.

#### **PMO6010 - Gaz et solides (1 crédit)**

Initier les étudiants aux divers processus physiques de sorption et d'interaction entre gaz et solides. Processus de sorption : adsorption sur surfaces solides et absorption dans les solides. Physique statistique et thermodynamique des processus de sorption. Interactions surface-gaz et solides-gaz. Nanocarbones. Hydrures métalliques : propriétés, diagramme de phase, formation d'hydrures. Comportement de l'hydrogène dans un cristal. Structure électronique des hydrures métalliques. Phénomènes de diffusion et d'électromigration de l'hydrogène dans les métaux.

#### **PMO6011 - Méthodes de simulation numérique en sciences des matériaux (1 crédit)**

Initier les étudiant(es) à l'utilisation de méthodes de simulations avancées dans le cadre de la science des matériaux. Probabilités et statistiques, Physique statistique. Analyse d'erreur. Méthodes numériques de base. Simulations Monte Carlo. Simulations de dynamique moléculaire. Corrections quantiques. Monte Carlo quantique. Simulations de chimie quantique. DFT quantique et dynamique moléculaire quantique.

#### **PMO6012 - Mécanique des fluides numériques (1 crédit)**

Initiation aux méthodes numériques de la mécanique des fluides computationnelle. Familiariser les étudiants avec l'implémentation de ces approches. Permettre aux étudiants de bien comprendre les avantages et les inconvénients des différentes méthodes de discrétisation des équations de Navier-Stokes.

Introduction aux méthodes numériques. Équations de Navier-Stokes. Méthode des Différences finies pour équations elliptiques, paraboliques et hyperboliques. Solveurs Navier-Stokes. Méthode des volumes finis. Méthode des éléments finis. Analyse d'erreur et stabilité. Maillages. Écoulements turbulents. Couches limites. Milieux poreux.

#### **PMO6013 - Phénomènes de transfert de chaleur et de masse (1 crédit)**

Initiation aux problèmes de transfert de masse, d'énergie et de chaleur dans différents milieux. Familiariser les étudiants avec les méthodes de solutions numériques et analytiques. Présenter la problématique du transport de chaleur et de masse dans différents contextes, allant des applications environnementales aux systèmes de conversion d'énergie.

Fondements. Diffusion. Conduction. Convection. Transfert radiatif. Transport de masse et d'énergie en milieux poreux.