

Stage Master 2 – 2021

« Nanocomposites de deux phases : simulations atomistiques de propriétés thermiques »

Encadrant : Konstantinos TERMENTZIDIS (CR CNRS) et Anne TANGUY (Professeur)

Durée : 6 mois

Lieu : CETHIL et LAMCOS, INSA de Lyon, Villeurbanne

Il s'agit d'une étude de transport thermique dans les nanocomposites de différentes phases ; nanoinclusions cristallines dans une matrice amorphe. Le but est la compréhension et le contrôle thermique et thermoélectrique à l'échelle nanométrique. Les nanocomposites forment une famille de nanomatériaux avec un potentiel de maîtrise de propriétés physiques très grand mais pour l'instant très peu exploité à cause des nouveaux phénomènes de transport thermique qui sont encore peu étudiés : les phénomènes comme la ballisticité, la percolation de phonons, les modes collectifs, la conductivité thermique spectrale et les effets hydrodynamiques ne peuvent être étudiés que par des simulations atomistiques du type dynamique moléculaire.

Dans le cadre de ce stage, le.e candidat.e poursuivra les efforts entrepris afin de modéliser des nanocomposites contenant deux phases : cristalline et amorphe et simuler le transfert thermique dans ces systèmes nanohybrides architecturés. Elle/il utilisera deux méthodes différentes: la dynamique moléculaire pour calculer la conductivité thermique effective des nanocomposites et la propagation d'ondes-phonons pour estimer le temps de vie et la vitesse de chaque phonon (quantum d'énergie de vibration dans un solide cristallin) individuel. Il y a deux configurations nanocomposites distincts à étudier : de nanoinclusions cristalline de GeTe aléatoirement orienter dans une matrice de carbone amorphe (figure-A) et de super-réseaux de couches nanométriques de nanocristallites de GeTe et de carbone amorphe (figure-B).

Ce stage permettra une ouverture sur les nanotechnologies et les calculs atomistiques.

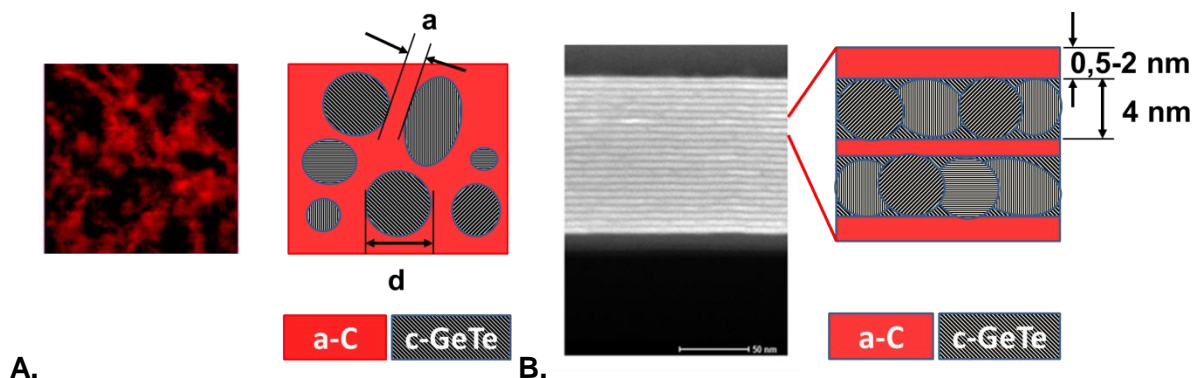


Figure : A. Image HRTEM et schématique de la configuration de cristallites de GeTe dans une matrice de carbone amorphe à modéliser et simuler avec des paramètres à étudier (distance entre les nanoinclusions « a » et diamètre « d » de nanoinclusions). B. Image STEM et schématique de la configuration de super-réseaux de c-GeTe/a-C avec une périodicité de 4,5 à 6nm.

But du stage : Apprentissage du code LAMMPS de dynamique moléculaire et d'un code numérique de propagation d'ondes dans un solide. Il s'agira de comprendre les mécanismes physiques et de comparer les résultats obtenus avec des résultats expérimentaux.

Travail à effectuer -Compréhension du concept ; prise en main des codes numériques déjà existants et premières adaptations et Rapport final.

Gratification : en accord avec les règles en vigueur

Dates : à définir.

Contact : konstantinos.termentzidis@insa-lyon.fr

Cadre : Projet ANR-MAPS, Possibilité éventuelle de poursuite en thèse