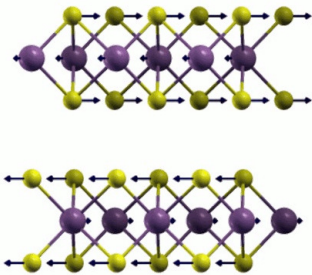


Proposition de stage de M2 (2017-18)

Equipe d'accueil : (Nano)matériaux pour l'énergie
 Institut Lumière Matière
 Université Claude Bernard Lyon 1-CNRS
 Campus Lyon Tech-La Doua

Etude théorique des propriétés de transport thermique dans les matériaux bi-dimensionnel.



L'une des thématiques fortes de l'équipe (nano)matériaux pour l'énergie correspond à la thermoélectricité. Les objectifs étant le développement de nouveaux matériaux et de nouveaux concepts pour la conversion d'énergie thermique/électrique (effet Seebeck). Cette thématique fait l'objet d'une synergie forte entre les expérimentateurs et les théoriciens de l'équipe, synergie dans laquelle la théorie tient une place motrice.

Le développement de nouveaux matériaux pour la thermoélectricité est confronté à l'antagonisme d'avoir des matériaux ayant des bonnes propriétés électroniques (conductivité, coefficient Seebeck) mais une faible conductivité thermique. En effet, le rendement de conversion thermique/électrique s'exprime à l'aide d'un facteur de mérite $ZT = \frac{\sigma \cdot S^2}{\kappa} T$ où σ est la conductivité électrique, S le coefficient Seebeck et κ la conductivité thermique. Nous possédons, parmi les théoriciens de l'équipe, une compétence forte sur la modélisation des propriétés électroniques (méthodes *ab initio* et modèles, formalisme de Landauer ...). Pour compléter les études du transport électronique, nous souhaitons également nous concentrer sur la modélisation des phonons et des propriétés thermiques.

L'objectif de ce stage sera tout d'abord pour le candidat de se familiariser avec un certain nombre d'outils *ab initio* (SIESTA, QuantumEspresso, VASP), puis d'en extraire une matrice dynamique (constantes de force dans l'approximation harmonique) afin de pouvoir en déduire les propriétés des phonons (relation de dispersion, densité d'états ...). Une fois familiarisé avec ces outils, l'étudiant cherchera dans le cadre de matériaux à 2 dimensions (graphène, MoS₂, WSe₂ ..) à proposer une stratégie pour réduire la conductivité thermique des matériaux sans affecter les propriétés électroniques. L'une des pistes pourra être par exemple, la nanostructuration.

Pour ce stage, le candidat devra avoir des facilités en programmation scientifique (fortran, C). Il devra faire preuve d'autonomie et avoir des capacités à prendre des initiatives. Une perspective de poursuite en thèse est envisageable.

Responsable du stage : Christophe Adessi (christophe.adessi@univ-lyon1.fr)

Co-responsable : Georges Bouzerar (georges.bouzerar@univ-lyon1.fr)

M2 Internship proposal

Theoretical modelization of the thermal transport properties of bi-dimensional materials.

One of the main topic of the (nano)materials team corresponds to thermoelectricity. The goals are the development of new materials and new concepts for the thermal to electric energy conversion. This topic is relying on a strong synergy between experimentalists and theoreticians for which theoreticians have a leading position.

The development of new material for thermoelectricity is facing the challenge of having materials with good electrical properties (conductivity, Seebeck coefficient) and a low thermal conductivity. Indeed, the efficiency of the thermal to electric energy conversion is based on the figure of merit $ZT = \frac{\sigma \cdot S^2}{\kappa} T$ where σ is the electrical conductivity, S the Seebeck coefficient and κ the thermal conductivity. Among the theoretician people of the team, we have a strong knowledge on the modelisation of the electronic properties (*ab initio* and model methods, Landauer formalism ...). In order to supplement the electronic studies, we would like to focus on the phonon modelisation and the thermal properties.

The aim of this internship will be first for the applicant to acustom with some *ab initio* tools (SIESTA, QuantumEspresso, VASP) with the goal to obtain dynamical matrices (force constants in the harmonic approximation) in order to compute the phonon properties (dispersion relations, density of states...). When the applicant will be used to these technics, he will try to propose a strategy in order to reduce the thermal conductivity of 2 dimension materials without affecting the electronic properties. One track should be for example the nanostructuration.

For this internship, the applicant must have fluency in scientific coding (fortran, C). He should be characterized by his autonomy and his ability to take initiatives. There is an option to go further with a PhD.