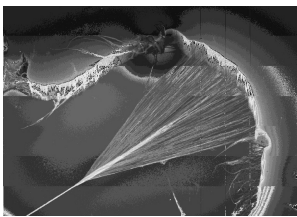


Proposition de stage de M2 (2016-17)

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

Modélisation théorique des propriétés de transport électronique de câbles de fagots de nanotubes de carbone multifeuillets.



Le stage proposé s'inscrit dans le cadre d'une collaboration de l'équipe avec le CEA de Grenoble qui produit des câbles constitués de fagots de nanotubes de carbone multifeuillets. L'objectif étant d'obtenir des câbles conducteurs beaucoup plus légers que les câbles traditionnels en cuivre. Ces câbles font actuellement l'objet d'une thèse expérimentale au sein de l'équipe (nano)matériaux pour l'énergie. L'objectif de ce stage est de développer des modèles théoriques afin d'étudier ces câbles et d'interagir avec les expérimentateurs afin d'améliorer leurs conductances.

Nous disposons au sein de l'équipe d'une compétence forte sur la modélisation théorique des propriétés de transport électronique de nano-systèmes par des méthodes *ab initio* et par des méthodes modèles. Cependant, pour étudier des systèmes macroscopiques comme les câbles de nanotubes, il sera nécessaire de mettre en œuvre des méthodes hybrides de calcul combinant ces deux approches. L'idée sous-jacente étant de partir de calculs *ab initio* sur des nanotubes multifeuillets en fagot afin de construire des systèmes modèles qui permettront dans un deuxième temps d'étudier les propriétés de ces câbles.

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) afin d'étudier les propriétés électroniques des nanotubes multifeuillets en fagot. Au-delà de ces calculs, il sera également demandé de se familiariser avec les techniques basées sur les fonctions de Green pour l'étude des propriétés de transport. Le candidat cherchera alors à mettre en place une stratégie afin de proposer une description modèle de ces systèmes. Une des pistes étant, par exemple, l'utilisation de fonctions de Wannier.

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 continuer en thèse est possible.

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 transport properties of cables based on multiwall carbon nanotube bundles.

The proposed internship comes in the context of a collaboration of the team with the Grenoble CEA center which is producing cables constituted of multiwall carbon nanotube bundles. The aim is to obtain conducting cables lighter than conventional copper cables. These cables are the subject of an experimental PhD thesis in the team “(nano)matériaux pour l’énergie”. The aim of this internship is to develop theoretical models in order to study these cables and to interact with experimentalists in order to improve their conductance.

One of the asset of the team is a strong knowledge in the theoretical modelization of the electronic transport properties of nano systems either with *ab initio* tools or with model methods. However, in order to study macroscopic systems as carbon nanotube cables, it will be mandatory to set up hybrid calculation methods combining these two approaches. The relying idea is to start with *ab initio* calculations on multiwall carbon nanotube bundles in order to build model systems which will allow us to study, in a second step, the properties of these cables.

The aim of this internship will be first for the applicant to acustom with some *ab initio* tools (Siesta, QuantumEspresso) in order to study the electronic properties of multiwall carbon nanotube bundles. Beyond these calculations, it will also be asked to get used to Green’s function technics for the study of transport properties. The applicant will then try to set up a strategy in order to obtain a model description of these systems. One track could be, for example, to use Wannier’s functions.

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.