

Propriétés thermodynamiques des matériaux par calculs ab initio

Contexte :

Établir les propriétés d'un matériau, et cela quelles que soient les températures et pressions, est un des plus grands enjeux de la physique moderne. Dans ce cadre, les calculs dits ab initio jouent un rôle important car ils permettent d'obtenir des données, même lorsqu'aucune expérience n'est réalisable dans les conditions thermodynamiques explorées. Le spectre de phonons (vibrations du réseau) est une donnée primordiale. Celui-ci permet d'obtenir ensuite de nombreuses autres grandeurs thermodynamiques (entropie, chaleur spécifique, énergie libre...). Cependant, le spectre de phonons, comme les autres grandeurs, peut être fortement affecté par la température, autrement dit par des effets dits anharmoniques.

Objectif du stage :

La dépendance explicite du spectre de phonons vis-à-vis de la température peut aujourd'hui être obtenue au moyen de dynamiques moléculaires ab initio. Ces études, bien que coûteuses en ressources de calcul, sont aujourd'hui réalisables, à la fois en raison des avancées théoriques mais aussi grâce aux efforts de développement des outils numériques. En particulier, nous disposons aujourd'hui d'un code de calcul de structure électronique ABINIT capable de profiter efficacement des capacités des supercalculateurs (Curie et TERA-1000) disponibles sur notre centre de recherche. L'objectif du stage sera d'obtenir, par calcul ab initio, différentes grandeurs thermodynamiques en température d'un matériau d'intérêt (Fe, Ti, U...).

Déroulement du stage :

Le stage débutera par un travail théorique d'appropriation des différentes techniques employées : simulations ab initio, dynamique moléculaire, calculs de spectres de phonons... Il se poursuivra par le calcul de différentes grandeurs thermodynamiques d'un matériau (Fe, Ti, U...) présentant de nombreuses phases en pression et température. Selon le profil du candidat et les résultats obtenus, ce stage peut se poursuivre par une thèse.

Possibilité de poursuivre en thèse :

Oui. Bourse CFR (Contrat formation par la recherche) : contrat financé à 100 % par le CEA.

Contact :

François BOTTIN & Grégory GENESTE

CEA/DIF – Bruyères-le-Châtel

01 69 26 41 73

francois.bottin@cea.fr

gregory.geneste@cea.fr