

Construction ab initio d'une équation d'état

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. Lorsque ces données thermodynamiques (expérimentales et/ou théoriques) sont disponibles, il est alors possible de construire une « équation d'état » (EoS). Dans ce cadre, les calculs dits ab initio jouent un rôle important car ils permettent de construire cette EoS, même lorsqu'aucune expérience n'est réalisable dans les conditions thermodynamiques explorées. L'une des briques de base de ces EoS est le spectre de phonons (vibrations du réseau). Celui-ci permet d'obtenir de nombreuses grandeurs thermodynamiques (entropie, chaleur spécifique, énergie libre...) nécessaires à la construction de l'EoS. Cependant, le spectre de phonons, comme les autres grandeurs, peut être fortement affecté par la température, autrement dit par des effets dits anharmoniques.

Objectif de la thèse :

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 de la thèse sera d'obtenir, par calcul ab initio, différentes grandeurs thermodynamiques en température d'un matériau d'intérêt (Fe, Ti, U...) puis de construire son EoS.

Déroulement de la thèse :

La thèse débutera par un travail théorique d'appropriation des différentes techniques employées : simulations ab initio, dynamique moléculaire, calculs de spectres de phonons, construction d'une EoS... Elle se poursuivra par la réalisation des différentes étapes de calculs permettant d'aboutir à la construction d'une EoS d'un matériau (Fe, Ti, U...) présentant de nombreuses phases en pression et température. Selon le profil du candidat, ce travail peut s'accompagner d'un développement théorique et d'implémentation afin d'obtenir d'autres grandeurs dérivées nécessaires à la construction d'une EoS.

Financement de la thèse :

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