

DRF : Sujet de thèse SL-DRF-19-0532

DOMAINE DE RECHERCHE

Physique du solide, surfaces et interfaces / Physique de l'état condensé, chimie et nanosciences

INTITULÉ DU SUJET

Etudes théoriques des propriétés physiques et optiques d'oxydes de titane pour des applications de capteur de gaz

RÉSUMÉ DU SUJET

Sous les auspices de la Convention-cadre des Nations Unies sur les changements climatiques (CCNUCC), la communauté internationale s'est engagée dans le développement de la politique de réduction des émissions de gaz à effet de serre (GES) afin de limiter les risques du changement climatique. Dans ce cadre et afin de d'avoir le meilleur suivi des concentrations en GES, il est important de développer un capteur haute performance et basse consommation adapté. Une méthode couramment utilisée pour mesurer la concentration de gaz consiste à utiliser des oxydes métalliques semi-conducteurs tels que SnO₂, ZnO et TiO₂. Certains modèles insistent sur l'importance du transfert de charge dans le mécanisme de détection, mais une étude à partir de premiers principes, incluant le couplage électronique avec phonons, est nécessaire pour mieux comprendre et de façon quantitative le processus d'adsorption du gaz et la réponse optique résultante du système.

Le couplage électron-phonon et la réponse optique d'un dispositif de capteur de gaz seront ainsi modélisées par les méthodes de la théorie fonctionnelle de la densité en fonction du temps, pour lesquelles l'équipe hôte a développé une expertise. Les simulations numériques seront effectuées avec le progiciel Quantum ESPRESSO. Une partie du projet consistera à développer les implémentations théoriques et numériques nécessaires. Le sujet demande ainsi que le candidat soit très motivé par la modélisation, l'informatique et la programmation.

INFORMATIONS PRATIQUES

Institut rayonnement et matière de Saclay

Laboratoire des Solides Irradiés

Laboratoire des Solides Irradiés

Centre : Saclay

Date souhaitée pour le début de la thèse : 01/10/2019

PERSONNE À CONTACTER PAR LE CANDIDAT

Nathalie VAST

CEA

DRF/IRAMIS/LSI/LSI

IRAMIS/LSI

Ecole Polytechnique

91120 Palaiseau

Téléphone : +33 1 69 33 45 51

Email : nathalie.vast@polytechnique.edu

UNIVERSITÉ / ÉCOLE DOCTORALE

Ecole Polytechnique

Interfaces: Approches interdisciplinaires / fondements; applications et innovation

EN SAVOIR PLUS

<https://www.polytechnique.edu/annuaire/fr/users/nathalie.vast>

<https://portail.polytechnique.edu/lisi/fr/recherche/theorie-de-la-science-des-materiaux>

DIRECTEUR DE THÈSE

Nathalie VAST

CEA

DRF/IRAMIS/LSI/LSI

IRAMIS/LSI

Ecole Polytechnique

91120 Palaiseau