



Proposition de stage M2 2017-2018

Responsables du stage

Noms : **Fabio Finocchi (INSP)**
and **Yael Bronstein (Saint-Gobain Recherche)**

Equipe : Oxydes en basses dimensions

Courriel : fabio.finocchi@upmc.fr (FF)

yael.bronstein@saint-gobain.com (YB)

Page web : <http://www.insp.jussieu.fr/-Finocchi-Fabio-.html>

Localisation : INSP - 4 place Jussieu, 75005
Paris – Tour 22 étage 5

Téléphone : +33 (0)1 44 27 51 16 (FF)

+33 (0)1 48 39 85 44 (YB)

Sujet du stage: Étude de l'adhésion de couches d'argent sur des oxydes par calcul ab initio

Le Groupe Saint-Gobain est aujourd'hui un des leaders mondiaux sur le marché de l'habitat, en apportant des solutions innovantes pour économiser l'énergie et protéger l'environnement. Dans ce contexte, des vitrages contrôle solaire et bas-émissifs à base d'empilements de couches minces sont développés pour des applications dans les domaines du bâtiment et de l'automobile, en permettant d'optimiser l'isolation thermique. Ces empilements de couches minces sont constitués de différents matériaux, avec en particulier une ou plusieurs couches d'argent déposés sur une couche d'oxyde métallique, typiquement de l'oxyde de zinc. L'interface entre ces deux matériaux est ensuite cruciale pour la résistance mécanique de l'empilement.

L'objectif du stage est de développer une méthode robuste basée sur des calculs ab initio (DFT) qui permette de calculer et de prédire l'énergie d'adhésion entre une couche d'argent et un substrat d'oxyde métallique. Différentes configurations ainsi que différents types d'oxyde (ZnO, TiO₂, MgO...) seront analysées afin d'améliorer la compréhension des mécanismes d'adhésion entre le substrat et ces couches. Les résultats et tendances obtenus pourront être confrontés à des expériences de clivage obtenus sur des couches minces déposées à SGR.

Ce stage s'adresse à des étudiants désirant appliquer des concepts de la physique du solide et des surfaces à la modélisation d'un problème industriel clé avec des retombées potentiellement importantes dans des applications concrètes.

Références bibliographiques :

- Meyer and Marx, Physical Review B 67, 035403 (2003)
- Lin Z. and Bristowe P.D., Physical Review B 75, 205423 (2007)
- Cornil D. et al., ACS Applied Materials and Interfaces 9, 18346 (2017)

Techniques utilisées : Calculs DFT – voir cours « Computational Materials Sciences » (CMS)

Qualités du candidat requises : Bases en physique du solide et physique des surfaces ; goût pour la modélisation.

Type de stage : théorique expérimental mixte

Stage rémunéré : oui non

Ce stage pourra-t-il se poursuivre en thèse : oui non

Si oui, financement envisagé :