

PROPOSITION DE STAGE

26 avril au 11 juin 2010

(Possibilité de commencer le 12 ou le 19 avril)

à retourner pour le 1^{er} octobre à duvail@cnrns-imn.fr ou ravel@subatech.in2p3.fr

Titre du stage : Rôle de l'azote dans la formation de nanotubes type « bamboo » par modélisation DFT

Nom, prénom et fonction du responsable de stage :

Ewels, Christopher, Chercheur CNRS CR1

Téléphone : 0240 37 6407

mél : chris.ewels@cnrns-imn.fr

Nom du laboratoire d'accueil, Adresse et nom du directeur :

Institut des Matériaux Jean Rouxel (IMN)

2 rue de la Houssinière, BP 32229, 44322 Nantes France

Directeur : Guy Ouvrard

Groupe : Physique des Matériaux et Nanostructures, Chef de Groupe : Jean-Luc Duvail

Sujet du stage (préciser le contexte et les travaux envisagés)

Le dopage des nanotubes de carbone (NTC) est un sujet très à la mode. En effet, l'azote peut améliorer la solubilité et la biocompatibilité des NTC ; l'azote peut également fortement modifier la structure des NTC. Notamment, le dopage par l'azote des NTC multi-feuillet peut favoriser la formation de tubes type « bamboo » qui comportent des compartiments le long du tube. A ce jour, la structure des tubes dopés azote n'est pas bien comprise, ni les mécanismes du dopage. Pour les NTC mono-feuillet, une concentration maximale de dopage est observée (typiquement 5%), mais cette valeur n'est pas expliquée. En comparaison, dans les couches minces carbonées de type sp^2 , le dopage par l'azote est typiquement limité vers 15%.

Dans cette stage, le dopage azoté des systèmes graphitiques sera étudié avec les techniques de modélisation atomique comme la DFT (théorie de la fonctionnelle de la densité). Avec le logiciel « Materials Studio », nous construirons les modèles atomiques et étudierons leur structure physique et électronique. Nous établirons dans quelle mesure l'azote peut transformer les nano-systèmes sp^2 (« graphite-like ») vers les matériaux sp^3 (« diamond-like »).

Ce travail nécessitera l'apprentissage de l'unix/linux, de logiciels de 'modélisation atomistique' comme AIMPRO, le programme « Materials Studio ». Le projet se déroulera en français ou en anglais (le responsable de stage, Chris, est anglais d'origine).

Outils, bibliographie, ... :

Voir <http://sb2.epfl.ch/instituts/akarimi/nanotube.html>

site web du Laboratoire

www.cnrns-imn.fr/PMN

ou

www.ewels.info