Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel
2, rue de la Houssinière BP 32229
44322 Nantes Cedex 3, France

Atomic-Scale Modelling of hydrogenated small fullerenes: from laboratory synthesis to astrochemical formation

Period : 1st semestre 2027
Host Organisation : Institut des Matériaux de Nantes, Université de Nantes / CNRS

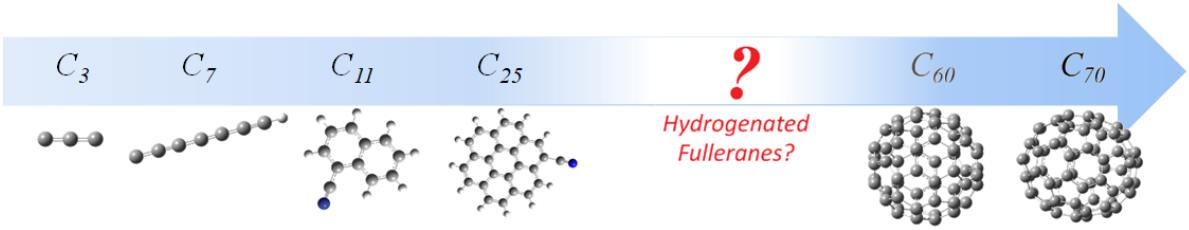
Project Coordinator : Chris Ewels

Tél. : 02.40.37.64.07 e-mail : chris.ewels@cnrs-imn.fr

Description:

In 1985, an interdisciplinary collaboration between astrochemists, organic chemists and cluster beamline physicists resulted in the Nobel prize winning discovery of C_{60}, Buckminsterfullerene in the laboratory. Some thirty years later it was firmly detected in space; in 2009 in planetary nebulae and in 2015 as C_{60}^+ in interstellar space. Its larger sibling C_{70} was also detected in similar environments, and the ubiquitous nature of these closed carbon cages in a wide range of astronomical environments is now well accepted.

While small carbonaceous fragments from C_2 to C_{25} have also been detected, the intermediate carbon cluster size range C_n, n=26→58 remains elusive. Notably, species in this range are lacking a clear laboratory spectroscopic fingerprint to be identified in space.



In this project you will use density functional theory quantum chemical models to explore the family of small hydrogenated fullerenes. We have previously developed a genetic algorithm to explore the range of hydrogenation configurations, and this work will need revisiting and completing. Following this we will try to link different structures to explore developmental pathways, as well as routes for C_{60} damage and fragmentation. We will combine this with higher level calculations to estimate their spectroscopic signatures and try to correlate with experimental work performed by the project partner at ISMO Paris.

If there is time there are many related structures to also explore (notably metallofullerenes, also curved carbon “blisters” in graphene). There is the possibility of a subsequent PhD based around this topic, although this will be subject to an open audition call. The project will require a background in materials science or physical chemistry, with solid experience in computer science and Python being a plus. It can be completed in French or English (or both), depending on the student's preference.

Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel
2, rue de la Houssinière BP 32229
44322 Nantes Cedex 3, France

Modélisation à l'échelle atomique de petits fullerènes hydrogénés : de la synthèse en laboratoire à la formation astrochimique

Période : 1er semestre 2027

Structure d'accueil : Institut des Matériaux de Nantes, Université de Nantes / CNRS

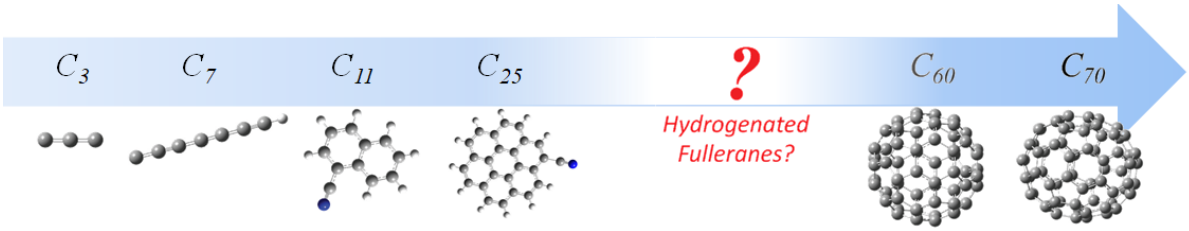
Responsable du stage : Chris Ewels

Tél. : 02.40.37.64.07 e-mail : chris.ewels@cnrs-imn.fr

Description du stage proposé :

En 1985, une collaboration interdisciplinaire entre des astrochimistes, des chimistes organiciens et des physiciens spécialisés dans les faisceaux de clusters a abouti à la découverte en laboratoire du C_{60}, ou buckminsterfullerène, qui a valu à ses auteurs le prix Nobel. Une trentaine d'années plus tard, sa présence a été clairement détectée dans l'espace : en 2009 dans des nébuleuses planétaires et en 2015 sous la forme de C_{60}^+ dans l'espace interstellaire. Son grand frère, le C_{70}, a également été détecté dans des environnements similaires, et la présence omniprésente de ces cages de carbone fermées dans un large éventail d'environnements astronomiques est désormais largement admise.

Si de petits fragments carbonés allant du C_2 au C_{25} ont également été détectés, la gamme intermédiaire de tailles des agrégats de carbone C_n, où n = 26 à 58, reste insaisissable. Il convient de noter que les espèces de cette gamme ne présentent pas d'empreinte spectroscopique claire en laboratoire permettant de les identifier dans l'espace.



Dans le cadre de ce projet, vous utiliserez des modèles de chimie quantique basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité pour explorer la famille des petits fullerènes hydrogénés. Nous avons précédemment développé un algorithme génétique pour explorer l'éventail des configurations d'hydrogénation, et ce travail devra être réexaminé et complété. Nous tenterons ensuite de relier différentes structures afin d'explorer les voies de développement, ainsi que les mécanismes de dégradation et de fragmentation du C_{60}. Nous combinerons ces travaux avec des calculs de niveau supérieur pour estimer leurs signatures spectroscopiques et tenter de les corréler avec les travaux expérimentaux menés par le partenaire du projet à l'ISMO de Paris.

Si le temps le permet, il existe de nombreuses structures connexes à explorer également (notamment les métallofullerènes, ainsi que les « cloques » de carbone courbées présentes dans le graphène). Il est possible d'enchaîner avec un doctorat sur ce sujet, mais cela sera soumis à un appel à candidatures ouvert. Le projet nécessitera une formation en science des matériaux / chimie physique, avec une expérience décente en informatique et en python en prime. Il peut être réalisé en français ou en anglais (ou les deux) selon les préférences de l'étudiant.