

Sujet de Master 2 CSM

Prédiction de structures cristallines de composés borures carbures des métaux de transition par algorithme évolutionnaire

Responsables : Bruno Fontaine,^a Jean-François Halet,^a Régis Gautier^a et Gilles Frapper^a

*^aEquipe « Chimie Théorique Inorganique », Institut des Sciences Chimiques de Rennes
^bIC2MP, université de Poitiers
email : halet@univ-rennes1.fr*

Le projet de stage se situe dans le domaine de la chimie théorique appliquée à la chimie du solide. Il vise à utiliser les possibilités offertes par la simulation numérique au moyen de méthodes de chimie quantique pour prédire l'arrangement structural de nouvelles phases solides hypothétiques. Plus précisément, il s'agira d'explorer, à l'aide l'algorithme évolutionnaire USPEX [1] couplé à des calculs de chimie quantiques, pour une composition chimique donnée à pression et température (P , T) choisies, l'hypersurface d'énergie potentielle afin d'identifier de nouvelles structures stables et métastables. L'étudiant se focalisera sur l'étude du diagramme de phase ternaire « métaux de transition – bore – carbone », visant l'émergence de nouvelles compositions qui pourraient développer des propriétés physiques intéressantes.

[1] <http://uspex.stonybrook.edu/uspex.html>.