

Étude ab initio de l'impact de l'environnement atomique du nickel sur la couleur d'oxydes mixtes lithium-nickel-tungstène

CONTEXTE

Saint-Gobain produit et vend des vitrages électrochromes sous la marque Sageglass®. Ces vitrages actifs ont la propriété de pouvoir se teinter à la demande, conférant un confort thermique et visuel pour leurs utilisateurs. La couleur de ces vitrages est un élément clé de leur performance et de leur esthétique. Le fonctionnement de ces vitrages repose sur l'application d'un potentiel qui fait migrer des ions lithium entre deux matériaux déposés en couches minces : le trioxyde de tungstène et un oxyde mixte nickel-tungstène. C'est ce dernier matériau auquel nous nous intéresserons dans le cadre de ce stage.

OBJECTIFS DU STAGE



Figure 1 : (à gauche) Sageglass® installé en façade de la tour Saint-Gobain dans l'état clair (gauche de l'image) et l'état sombre (droite de l'image), Paris La Défense. (à droite) Couleur d'oxydes mixtes nickel, tungstène ou nickel-tungstène obtenus par synthèse de poudres.

Un grand nombre de phases différentes peuvent être obtenues par synthèse inorganique de poudres en fonction de la composition choisie pour l'oxyde mixte lithium-nickel-tungstène. Une de ces phases vient d'être découverte et caractérisée dans le cadre des études menées à Saint-Gobain Recherche. Ces poudres présentent une variété de couleurs pour des raisons qui sont encore peu explorées.

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est une méthode de calcul quantique utilisée pour prédire la structure électronique et les interactions atomiques dans les phases condensées. Or les matériaux étudiés étant semi-conducteurs, leur couleur dépend du band-gap optique que présente le système. Ce band-gap optique est lui-même relié au band-gap électronique de la structure de bandes du matériau.

Au cours de ce stage, on se propose d'utiliser la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) pour modéliser la structure de bande électronique de plusieurs phases oxydes mixtes nickel-tungstène : certaines bien connues, d'autres nouvelles. Ces résultats serviront à relier l'environnement atomique local du nickel et les propriétés électroniques des matériaux à leurs couleurs, permettant d'apporter un éclairage nouveau sur les résultats expérimentaux.

PROFIL SOUHAITÉ

Étudiant-e en M2 recherche ou école d'ingénieur avec une spécialisation en physique ou chimie des matériaux. Une appétence pour les calculs théoriques et des connaissances en programmation, calculs numériques et plus généralement en informatique seront valorisées. De bonnes capacités d'organisation, d'autonomie et une motivation pour le sujet sont également recherchées.

Durée : 6 mois

Lieux : INSP, 4 Place Jussieu, Paris
SGR Paris, 39 quai Lucien Lefranc,
Aubervilliers

Contacts :

Fabio Finocchi (fabio.finocchi@insp.jussieu.fr)
Amaury Patissier (Amaury.Patissier@saint-gobain.com)
Axel Fouques (Axel.Fouques@saint-gobain.com)
Cynthia Fourmental (cynthia.fourmental@saint-gobain.com)
Adrien GOLA (Adrien.Gola@saint-gobain.com)