

Spécialité de Master « Optique, Matière, Plasmas »

Stage de recherche (4 mois minimum, à partir de début mars 2012)

Proposition de stage pour l'année 2011-2012 (ne pas dépasser 1 page)

Date de la proposition :

Responsable du stage / internship supervisor:			
Nom / name:	Calvo	Prénom/ first name :	Florent
Tél :	04 72 44 83 14	Fax :	04 72 43 15 07
Courriel / mail:	fcalvo@lasim.univ-lyon1.fr		
Nom du Laboratoire / laboratory name:			
Code d'identification :	LASIM	Organisme :	Université Lyon 1 – CNRS UMR5579
Site Internet / web site:	http://www-lasim.univ-lyon1.fr/		
Adresse / address:	Domaine Scientifique de la Doua Université Claude Bernard Lyon 1 Bâtiment Alfred Kastler 43, bd du 11 Novembre 1918 69622 Villeurbanne cedex		
Lieu du stage / internship place:	Villeurbanne, Domaine Scientifique de la Doua		

Titre du stage / internship title: <i>Modélisation de la structure et dynamique de nanoparticules sur graphène épitaxié sur métaux</i>
Résumé / summary
<p>Le dépôt d'une monocouche de graphène sur certains métaux de transition de cristallographie cubique offre des perspectives pour l'assemblage de matériaux nanostructurés et périodiques, ouvrant des pistes pour le stockage magnétique de haute densité. Cette structuration est rendue possible par la compétition entre les deux réseaux incommensurables du substrat, donnant lieu à des effets de Moiré visibles en microscopie électronique.</p> <p>L'objet de ce stage est d'étudier par simulation numérique la stabilité de nanoparticules déposées sur graphène épitaxié sur métal. Nous souhaitons dans un premier temps simplifier la modélisation, en traitant les interactions métal-substrat par des potentiels explicites respectant les symétries respectives du graphène et du métal sous-jacent, la nanoparticule étant modélisée quant à elle via des champs de forces analytiques. Munis du modèle, il s'agira de déterminer les structures d'équilibre par des méthodes d'optimisation Monte Carlo, puis le comportement à température finie par simulation de dynamique moléculaire.</p> <p>Au cours de ce stage, le(la) candidat(e) motivé(e) mettra en place des outils de simulation moléculaire permettant de caractériser les structures d'équilibre et la dynamique d'agrégats métalliques sur de tels substrats. De bonnes connaissances en physique moléculaire ou physique de l'état condensé, ainsi qu'en mécanique statistique seront appréciées.</p> <p>Ce stage pourra se poursuivre sur une thèse, dont l'ambition sera de caractériser les interactions entre nanoparticule et substrat par des méthodes traitant explicitement la structure électronique, puis de modéliser plusieurs particules déposées et les mécanismes régissant leur auto-assemblage éventuel.</p>
Toutes les rubriques ci-dessous doivent obligatoirement être remplies

Ce stage pourra-t-il se prolonger en thèse ? Possibility of a PhD ? : Oui			
Si oui, financement de thèse envisagé/ financial support for the PhD: Bourse Ministère			
Lasers et matière	x	Lumière, Matière : Mesures Extrêmes	x
Optique de la science à la technologie		Plasmas : de l'espace au laboratoire	

Fiche à transmettre (fichier pdf **obligatoirement**) sur le site <http://stages.master-omp.fr>

