

# Étude des propriétés optiques d'oxydes électrochromes par DFT et théorie des perturbation électronique à plusieurs corps.

## 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. Les propriétés optiques de ces vitrages sont la clé de leur performance et de leur esthétique. Leur fonctionnement 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 lithium-nickel-tungstène. C'est cette dernière classe d'oxyde mixte qui sera étudiée lors de cette thèse.

Pour déterminer la structure électronique de ces oxydes à partir de leur structure atomique, on utilisera la théorie fonctionnelle de densité (DFT), domaine d'expertise de Fabio Finocchi de l'équipe Oxydes en basses dimensions de l'INSP. Les propriétés optiques relevant quant à elles des états excités (alors que la DFT est une théorie de l'état fondamental), une approche basée sur la théorie des perturbations électroniques à plusieurs corps sera également nécessaire pour cette étude, dont l'expertise sera assurée par Michele Amato, de l'équipe STEM du LPS d'Orsay.

## OBJECTIFS DE THÈSE

Un grand nombre de phases peuvent être obtenues par synthèse inorganique de poudres en fonction de la composition de 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<sup>1</sup>. Ces matériaux, présentant une grande variété de couleurs (voir image ci-contre), seront étudiés par DFT afin de savoir s'il est possible d'être prédictif de leurs relations structures-propriétés.



Les objectifs de ce projet de thèse sont donc pour ces matériaux :

- De calculer la structure électronique dans le cadre de la DFT en utilisant plusieurs approches pour décrire les effets d'échange et de corrélation entre les électrons. En particulier, des fonctionnelles hybrides HSE seront utilisées<sup>2</sup>, permettant de calculer la structure électronique à un niveau de précision comparable aux méthodes post-DFT.
- À partir de la structure électronique déterminée par DFT, une approche basée sur la théorie des perturbations électroniques à plusieurs corps sera appliquée afin d'étudier les propriétés optiques, avec comme ingrédient clé la fonction de polarisation dynamique, calculée à différents niveaux d'approximations.
- Afin de se rapprocher de la structure réelle des matériaux dans leur utilisation industrielle, le désordre structural sera finalement modélisé en utilisant des configurations atomistiques générées par la méthode des structures spéciales quasi-aléatoires<sup>3</sup>.

<sup>1</sup> S.Redor et al, J. Am. Chem. Soc. 145, 23 (2023)

<sup>2</sup> J. Heyd, et al, J. Chem. Phys. 118, 8207 (2003)

<sup>3</sup> A. Zunger, et al, Phys. Rev. Lett., 65, 353 (1990)

## PROFIL SOUHAITE

Étudiant-e en M2 recherche ou école d'ingénieur avec une spécialisation en physique ou chimie des matériaux, ayant une forte appétence pour les calculs théoriques. 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.

## DUREE LIEU

3 ans

La thèse se déroulera entre l'Institut de NanoSciences de Paris (INSP) de Jussieu et le Laboratoire de Physique du Solide (LPS) d'Orsay. Le suivi sera également assuré par l'équipe Couches pour Systèmes Avancés de Saint-Gobain Recherche (SGR) à Aubervilliers.

## CONTACT

- SGR Paris : Amaury Patissier [Amaury.Patissier@saint-gobain.com](mailto:Amaury.Patissier@saint-gobain.com), Axel Fouques [Axel.Fouques@saint-gobain.com](mailto:Axel.Fouques@saint-gobain.com), Cynthia Fourmental [cynthia.fourmental@saint-gobain.com](mailto:cynthia.fourmental@saint-gobain.com)  
- INSP : Fabio Finocchi [fabio.finocchi@insp.jussieu.fr](mailto:fabio.finocchi@insp.jussieu.fr)  
- LPS : Michele Amato [michele.amato@universite-paris-saclay.fr](mailto:michele.amato@universite-paris-saclay.fr)

## A PROPOS DE SAINT-GOBAIN

Leader mondial de la construction durable, Saint-Gobain conçoit, produit et distribue des matériaux et services pour les marchés de l'habitat et de l'industrie. Développées dans une dynamique d'innovation permanente, ses solutions intégrées pour la rénovation des bâtiments publics et privés, la construction légère et la décarbonation du monde de la construction et de l'industrie apportent durabilité et performance. L'engagement du Groupe est guidé par sa raison d'être « MAKING THE WORLD A BETTER HOME ».

51,2 milliards d'euros de chiffre d'affaires en 2022 168 000 collaborateurs dans 75 pays

Engagé à atteindre la Neutralité Carbone à 2050

Pour en savoir plus sur Saint-Gobain, Visitez <http://www.saint-gobain.com> et suivez-nous sur Twitter @saintgobain.

Saint-Gobain Research Paris est l'un des huit grands centres de recherche transversaux qui servent toutes les Activités de Saint-Gobain, <https://www.sgr-paris.saint-gobain.com/>