

## Le transport de chaleur dans les solides, au-delà de l'approximation classique

Contact : **Stefano MOSSA** DRF//INAC/SYMMES/STEP [stefano.mossa@cea.fr](mailto:stefano.mossa@cea.fr) 0438783577

**Stage pouvant se poursuivre en thèse : Oui**

### Résumé :

L'objectif de ce projet est d'établir une méthodologie, basée sur le formalisme des intégrales de chemin, permettant de prendre en compte avec précision l'influence des effets quantiques nucléaires sur les propriétés de transport, en particulier le transport thermique, dans les systèmes condensés. Il s'agit d'une tâche très ambitieuse qui aurait des implications profondes dans de nombreux domaines de recherche, allant des questions de physique fondamentale au développement de matériaux avancés pour des applications technologiques modernes.

Nous envisageons de commencer à appliquer la méthodologie par une simple étude de cas archétypique, le cristal de Lennard-Jones, en nous concentrant sur des grandeurs simples (fonction d'auto-corrélation de vitesse, par exemple) et en comparant les calculs de l'intégrale de chemin avec des approximations semi-classiques.

En cas de succès, le stage pourrait être étendue à un projet de thèse sur le calcul de la conductivité thermique dans les solides, financé par un projet ANR. Il s'agira de systèmes présentant un intérêt à la fois fondamental et pratique pour la science de la matière condensée. En particulier, nous nous concentrerons, d'une part, sur les systèmes amorphes (verres) et tenterons de clarifier, dans un cadre de calculs ab-initio, l'origine des anomalies à basse température dans les propriétés thermiques. D'un autre côté, plus en perspective et évoluant vers des systèmes de plus en plus complexes, nous nous concentrerons au contraire sur des structures très ordonnées à l'échelle nanométrique, où une conception soignée avec une très haute résolution spatiale peut déclencher des réponses thermiques remarquables.

### Sujet détaillé :

Le transport de chaleur dans les matériaux est une propriété clé pour un certain nombre d'applications, et des efforts importants sont consacrés à la conception de matériaux ayant une conductivité thermique élevée (pour les applications de transport de chaleur) ou faible (par exemple, pour la conversion thermoélectrique). À l'exception des bons conducteurs métalliques, la conductivité thermique est en général dominée par les vibrations atomiques. Le but de ce projet est d'établir une méthodologie pour déterminer la contribution vibratoire à la conductivité thermique des matériaux, en utilisant le formalisme des intégrales de trajectoire (IP). Cela permet de prendre en compte avec précision les effets quantiques nucléaires (NQE) dans les systèmes de matière condensée.

En effet, il peut être surprenant de constater que, malgré les nombreux développements de la modélisation microscopique des matériaux au cours des 40 dernières années, il nous manque encore une méthode générale bien établie pour calculer la conductivité thermique des matériaux solides isolants (ou mauvais conducteurs électriques). Cette affirmation peut sembler provocante, car de nombreux calculs de conductivité thermique dans les solides ont été effectués sur tous les types de matériaux solides. Le point clé, cependant, est que tous ces calculs font l'hypothèse que le système considéré peut être décrit par la mécanique classique. Ceci n'est tout simplement pas correct pour de nombreux systèmes à matière condensée, même à des températures relativement "élevées". Deux chiffres simples illustrent ce problème. Premièrement, la longueur d'onde thermique du proton à 300 K est d'environ 0.1 nm, comparable à de nombreuses distances intermoléculaires typiques. Par conséquent, la délocalisation des protons affecte certainement les propriétés vibratoires dans de nombreux systèmes moléculaires. Deuxièmement, dans l'aluminium, la température de Debye est  $T_D=430$  K. Les vibrations à haute fréquence seront donc largement appauvries par rapport à l'approximation classique, même à 300 K. En fait, plusieurs travaux récents ont démontré l'importance des effets quantiques nucléaires pour de nombreux systèmes différents de matière condensée,

allant de la structure électronique de l'eau aux propriétés thermoélastiques des verres au silicate.

Notre objectif est donc de développer un cadre précis pour le calcul de la conductivité thermique dans les matériaux isolants, basé sur des intégrales de chemin, et allant au-delà des approximations normalement utilisées dans ce type de calculs (centroïde ou polymère annulaire MD). En outre, en tant que contrainte cruciale, nous voulons développer un schéma applicable de manière générale aux états ordonnés et désordonnés de la matière, en évitant toute référence à l'existence d'une structure en treillis sous-jacente bien définie. Notre approche s'appuiera d'abord sur le calcul de fonctions imaginaires de corrélation temporelle du flux de chaleur, qui peuvent être poursuivies analytiquement en temps réel. Cela permettra, ensuite, de calculer avec précision les coefficients de transport nécessaires, en appliquant le formalisme Green-Kubo. Une telle approche, déjà formulée dans les années 1980, est formellement exacte, mais le calcul correspondant est difficile et nécessite un choix minutieux des estimateurs des opérateurs impliqués. Il est également extrêmement intensif en calcul. Les ressources informatiques requises, au niveau actuel de performances, devraient cependant permettre de contourner ces limitations en permettant la détermination ultra-précise des fonctions de corrélation nécessaires. D'autres méthodes, telles que l'utilisation de bains thermiques quantiques, seront également utilisées pour compléter l'approche IP ou pour comparer nos résultats aux travaux précédents.

Le développement des méthodes présentées ci-dessus constitue la tâche la plus difficile du projet. Ce sera également le tremplin pour s'attaquer à des problèmes de longue date qui peuvent bénéficier de manière significative d'une approche qui échantillonne exactement les fluctuations associées aux effets quantiques nucléaires. Il s'agit, entre autres, de plusieurs propriétés et mécanismes microscopiques liés au comportement thermique des matériaux, par exemple, l'existence (ou l'absence) de systèmes à deux niveaux dans le spectre vibratoire des solides désordonnés, ou la possibilité de contrôler la conductivité en adaptant la structure à l'échelle nanométrique.

**Compétences requises :**

Formation de physicien. Excellentes connaissances en physique générale et en mécanique quantique. Compétences en programmation (Python, C/C++,...) en environnement Linux. Anglais parlé et écrit couramment.