

Internship - Electronic structure properties of 2D functional materials by first principle calculations based on Density Functional Theory (H/F)



Physique & Simulation
Federico Iori



2020



6 months

The company

Air Liquide is the world leader in gases, technologies and services for industry and healthcare. Present in 80 countries with approximately 65,000 employees, the Group serves more than 3.5 million customers and patients. Air Liquide places diversity at the heart of its activities and is committed in particular to promoting professional equality and the employment of workers with disabilities.

The Paris Innovation Campus (78 - Les Loges en Josas) is Air Liquide's largest R&D center.

It develops innovative solutions for all the Group's activities. More than 250 researchers work in 48 laboratories equipped with state-of-the-art equipment and experimental platforms, allowing them to explore many areas of research.

Mission and Responsibilities

The research work planned for this internship focuses on the use of quantum numerical simulations based on Density Functional Theory (DFT) to study the properties of materials at the atomic scale. The trainee will be supported in a theoretical and computational study on the structural and electronic properties of two-dimensional materials (2D functional materials) using numerical codes based on DFT, plane wave and pseudopotential methodologies. At the end of the internship, thanks to the support of the simulations, functional materials will be proposed as candidates for coatings against hydrogen embrittlement.

During and in crescendo at the end of the internship, it is expected that the intern will be able to

- master the fundamentals of DFT and its use in quantum simulation codes
- master numerical simulations and post-processing of data in a sufficiently autonomous manner
- be open to discussion and exchange on the results achieved and on the progress of the project
- develop a critical awareness on the problematic studied
- produce a final report of the internship

Profile and skills required

- ✓ Master student in Physics or Chemistry or Materials Science
- ✓ Open-mind,, ability to interact with other members of the Centre's team and services
- ✓ Fluency in English (at least at a scientific level)
- ✓ Knowledge of quantum mechanics, condensed state of matter, electronic structure of solids
- ✓ Elements of Density Functional Theory (DFT) and ab initio DFT numerical simulations (Quantum Espresso, VASP, Siesta, Abinit or similar) (plus)
- ✓ Elements of Linux, Python and Fortran
- ✓ Physics / Quantum chemistry applied to solids
- ✓ Crystallography (plus)
- ✓ Elements of parallel computing (plus)



federico.iori@airliquide.com

STAGE - Structure électronique de matériaux fonctionnels bidimensionnels par calculs de Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) (H/F)



Physique & Simulation
Federico Iori



2020



6 mois

L'entreprise

Air Liquide est le leader mondial des gaz, technologies et services pour l'industrie et la santé. Présent dans 80 pays avec environ 65 000 collaborateurs, le Groupe sert plus de 3,5 millions de clients et de patients.

Air Liquide place la diversité au cœur de ses activités et s'engage notamment en favorisant l'égalité professionnelle et l'emploi des travailleurs en situation de handicap.

Le Campus Innovation Paris (78 - Les Loges en Josas) est le plus grand centre de R&D d'Air Liquide.

Il développe des solutions innovantes pour l'ensemble des activités du Groupe. Plus de 250 chercheurs travaillent dans 48 laboratoires dotés de matériel de pointe et de plateformes expérimentales, permettant d'explorer de nombreux domaines de recherche.

Missions et Responsabilités

Le travail de recherche prévu dans ce stage est axé sur l'utilisation de **simulations numériques quantiques** qui s'appuient sur la **Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)** pour étudier les propriétés des matériaux à **l'échelle atomique**. Le stagiaire sera accompagné dans une étude théorique et computationnel des **propriétés structurales** et **électroniques** de matériaux bidimensionnels (**2D functional materials**) en utilisant codes de calculs basés sur des méthodologies DFT, onde planes et pseudopotentiels. A la fin du stage, grâce au support des simulations numériques, des matériaux fonctionnels seront proposés comme candidats pour des revêtements contre la fragilisation par hydrogène.

Pendant et *in crescendo* à la fin du stage, on s'attend que le stagiaire puisse

- maîtriser les fondamentaux de la DFT et son utilisation dans des codes de simulation quantique
- maîtriser les simulations numériques et le post traitement des données de façon suffisamment autonome
- être ouvert.e à la discussion et à l'échange sur les résultats acquis et sur l'avancement du projet
- développer une conscience critique sur la problématique d'intérêt
- produire un report final de stage

Profil et compétences recherchés

- ✓ Étudiant de Master 2 en Physique ou Chimique ou Science des Matériaux
- ✓ Ouverture d'esprit, capacité d'interaction avec les autres membres de l'équipe et des services du Centre
- ✓ Maîtrise de l'anglais (au moins à niveau scientifique)
- ✓ Connaissance de mécanique quantique, état condensé de la matière, structure électronique des solides
- ✓ Physique / Chimie quantique appliquée aux solides
- ✓ Éléments de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (plus)
- ✓ Éléments des simulations numériques *ab initio* (Quantum Espresso, VASP, Siesta, Ab init, Gaussian ou similaires) (plus)
- ✓ Éléments de Linux, Python et Fortran (plus)
- ✓ Cristallographie (plus)



Responsable: federico.iori@airliquide.com