

Proposition de sujet de MASTER

Université d'Orléans

Laboratoire : GREMI Adresse: Université d'Orléans <i>14 Rue d'Issoudun</i> <i>45067 ORLEANS Cedex 2</i>	<i>2018-</i> <i>2019</i>
Responsable(s) du stage: Pascal Brault Téléphone: 02 38 41 71 25 e-mail: pascal.brault@univ-orleans.fr Profil souhaité : Stage M2 : simulation moléculaire interaction plasma-surface	

Titre : Etude par dynamique moléculaire de la fonctionnalisation de graphène par un plasma d'aniline.

Sujet:

En vue de fabriquer de nouveaux composants pour l'énergie, en particulier des supercondensateurs, la conception de matériaux composites à base de carbone est une voie très intéressante. Dans ce cadre, il est intéressant de mener des études de simulation à l'échelle moléculaire pour comprendre les étapes élémentaires de croissance de ce type de matériau. Par ailleurs la voie plasma a un grand potentiel de variétés des systèmes produits. A partir de données expérimentales sur les procédés plasma de dépôts de polyaniline, il s'agira de construire un ensemble de simulation visant à comprendre l'interaction Aniline et polyaniline sous diverses formes (clusters, feuillets, fils, ...) avec un feuillet de graphène afin de comprendre la fabrication de systèmes composites polyaniline/graphène.

Cette proposition s'inscrit dans le cadre du projet européen FET-OPEN PEGASUS.