

Sujet de thèse :

Etude par simulation de dynamique moléculaire et spectroscopie de fluorescence de l'effet d'étirage sur la structure, la composition et les propriétés de luminescence de nanoparticules dopées terre-rare dans la silice

Laboratoire de Photonique d'Angers (LPhIA)

Les fibres optiques à base de silice offrent toujours de nombreuses perspectives car elles présentent de réels avantages économiques et offrent d'excellentes qualités mécaniques et optiques. Toutefois, le développement de nouvelles applications les utilisant comme matériau amplificateur grâce à l'émission stimulée des ions luminescents nécessite de repenser la nature et la structure du cœur de ces fibres dopées pour atteindre des propriétés d'amplification « augmentées ». Aussi, une voie en cours d'exploration est l'encapsulation des ions luminescents dans des nanoparticules diélectriques permettant le contrôle de l'environnement (structure et composition) et de pratiquer une ingénierie des propriétés spectroscopiques.

Le laboratoire de Photonique d'Angers (LPhIA) s'est engagé dans cette exploration en 2014 et a apporté des résultats fondateurs concernant la modélisation par dynamique moléculaire et la compréhension de la formation de nanoparticules de composition $x\text{MgO}-(1-x)\text{SiO}_2$ dans la silice [1]. Des résultats préliminaires ont par ailleurs été obtenus concernant l'effet de l'étirage sur la structure de la silice pure [2]. En appui sur ces résultats, il est désormais question de modéliser et de comprendre l'effet de l'étirage sur ces nanoparticules dopées d'ions terre-rare. C'est l'objet du projet NanoSlim (*Designing nanoparticles during the drawing of optical fibres*), financé par l'ANR, démarré en janvier 2018 et impliquant un consortium de 7 laboratoires (LPhIA à Angers, InPhyNi à Nice, GPM à Rouen, ICGM à Montpellier, CEMES à Toulouse, CP2M à Marseille, et ICI-ECN à Nantes). La thèse proposée s'inscrit dans le cadre de ce projet, et permettra au doctorant de bénéficier d'un large réseau de laboratoires avec lesquels il sera amené à collaborer.

Le travail du doctorant consistera à modéliser par simulations de dynamique moléculaire les effets de l'étirage, dans différentes conditions de température et de tension, sur la structure, la composition et les propriétés de luminescence des nanoparticules dopées terre-rare dans la silice. Les résultats attendus concernent (i) la détermination d'une fonction de transfert de l'étape d'étirage, afin de spécifier les propriétés requises pour les nanoparticules dans la préforme en vue des propriétés requises dans la fibre ; (ii) le calcul de propriétés physiques telles que la viscosité, les coefficients de diffusion et les tensions de surface, qui pourront servir les modélisations par la méthode des éléments finis conduites parallèlement par les collègues de l'équipe nantaise ; (iii) la mise en œuvre de modèles permettant de lier la structure des environnements locaux des ions terre-rare avec leurs propriétés de luminescence. Des mesures expérimentales de fluorescence seront également réalisées au LPhIA à partir d'échantillons produits par les partenaires du projet. Ces mesures seront analysées et comparées aux résultats des simulations.

Le doctorant devra utiliser le code LAMMPS (logiciel libre de dynamique moléculaire classique) et bénéficiera de moyens de calcul propre au LPhIA comme de l'accès aux ressources du Centre de Calculs Intensifs de la région Pays de la Loire (CCIPL). De solides connaissances en programmation (C/C++) sont requises et une expérience de modélisation par dynamique moléculaire classique est fortement souhaitée.

[1] X. Bidault, S. Chaussedent and W. Blanc, "A simple transferable adaptive potential to study phase separation in large-scale $x\text{MgO}-(1-x)\text{SiO}_2$ binary glasses" *J. Chem. Phys.* **143**, 154501 (2015).

[2] X. Bidault, S. Chaussedent, W. Blanc and D.R. Neuville, "Deformation of silica glass studied by molecular dynamics: Structural origin of the anisotropy and non-newtonian behavior" *J. Non-Cryst. Solids* **433**, 38-44 (2016).

Contact :

Stéphane Chaussedent (stephane.chaussedent@univ-angers.fr – 02 41 73 54 29)
Laboratoire de Photonique d'Angers (LPhIA – UPRES EA 4464 – Université d'Angers)