

Proposition de thèse

Croissance des composés III-N et de leurs alliages : développement des outils numériques pour l'optimisation des propriétés

Les matériaux semiconducteurs nitrures se sont développés considérablement depuis les années 1990 avec la mise au point des couches tampons par Amano et Akasaki et la démonstration de l'émission par Nakamura (Prix Nobel 2014). Ils contribuent fortement à l'évolution des technologies de la Communication. L'équipe PM2E travaille depuis deux décennies sur la compréhension des mécanismes mis en jeu dans la production de ces composés (AlN, GaN, InN) et de leurs alliages ternaires et quaternaires. Notre recherche fondamentale est une collaboration étroite entre la modélisation ; une démarche expérimentale multi-échelle depuis les rayons X et la microscopie électronique jusqu'à l'échelle sub-angström. Elle permet de déterminer de façon très robuste les structures atomiques et électroniques des matériaux, ainsi que les propriétés physiques, chimiques et mécaniques associées.

L'objectif de cette thèse est double : Analyser les défauts et leurs interactions dans ces matériaux pour enrichir la connaissance de ces derniers et développer des outils numériques permettant la caractérisation et la simulation de la croissance. A la suite à des tests à plus petite échelle à l'aide des techniques ab-initio pour mettre en évidence les tendances, les matériaux étudiés seront régi par des potentiels empiriques pour prendre en compte des systèmes avec un nombre important d'atomes. Le processus dynamique incluant la température comme un des paramètres de l'évolution sera analysé. Pour conforter cette démarche, nous décrirons aussi des défauts connus et leurs possibles interactions afin de comparer avec des résultats existants. Bien évidemment, les propriétés de base des matériaux modélisés seront déterminées, ainsi nous aurons accès à la structure atomique, la chimie locale, ainsi qu'au comportement mécanique et électronique.

Profil et compétences pour le doctorant

Etudiant(e) avec master 2, physique des matériaux, modélisation.

Attrait pour la simulation.

Rigueur, autonomie, curiosité.

Un stage M1, ou L1 dans le domaine des matériaux semiconducteurs serait apprécié.

Directeur :

Professeur Jun Chen

jun.chen@unicaen.fr

Codirecteur :

Dr. Viwanou Hounkpati

viwanou.hounkpati@unicaen.fr