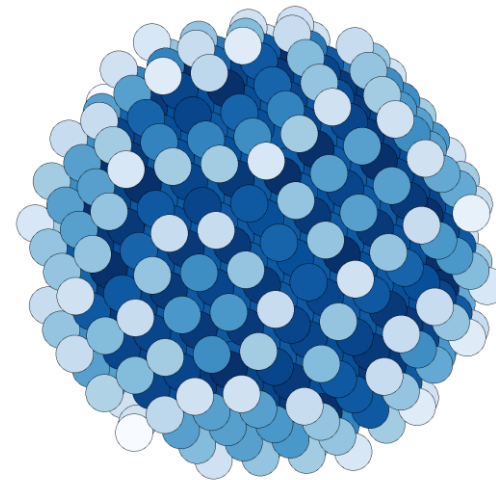


Ce projet est cofinancé par la Région Normandie et l'Union européenne



Laboratoire CIMAP – UMR6252



AMoDaCCF

Adaptation de la Modélisation DFTB au Contexte des Champs Forts

Objectifs du projet

Déterminer une extension théorique de la méthode SCC-DFTB (Self-Consistent Charge Density-Functional Tight-Binding) pour décrire efficacement des atomes soumis à des champs électriques importants.

Construire un paramétrage effectif sous champ-fort pour les semi-conducteurs en utilisant ce nouveau développement.

Employer cette modélisation pour effectuer des calculs d'émission d'ions par effet de champ simulant le mécanisme de fonctionnement de la sonde atomique tomographique (SAT).

Moyens mis en œuvre

- 1 post-doctorant spécialiste DFTB.
- Analyse de la localisation de charge dans des agrégats chargés.
- Prédiction des charges atomiques basées sur un algorithme d'intelligence artificielle (IA).
- Analyse de l'émission d'atomes neutre et d'ions de différente charge.
- Introduction d'orbitales de polarisation dans le code DeMon-nano (code open source).
- Application à des agrégats métallique (Al) et des agrégats semi-conducteur (SiC)
- Application à des molécules de type polycyclique aromatique (PAH).

Résultats attendus

- Code permettant de décrire précisément les effets de polarisation à l'échelle moléculaire dans des systèmes étendus de plusieurs centaines d'atomes.
- Prédiction et analyse de l'émission sélective d'atomes par une méthode combinant IA et DFTB.
- Application aux métaux et au semi-conducteurs comme le SiC, AlN ou GaN.
- Compréhension des biais de composition observés en SAT (sonde atomique tomographique).
- Modélisation correcte de la structure des cations moléculaires de type PAH observés dans le milieu interstellaire.