



Laboratoire CIMAP

Centre de recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique

UMR 6252 – CEA – CNRS – ENSICAEN – UNICAEN

6 Boulevard Maréchal Juin

14050 Caen Cedex 4

✓ Proposition de sujet de stage M2

Titre : Étude par simulation moléculaire de la stabilité des défauts dans les semi-conducteurs III-V.

Contacts :

Jun Chen jun.chen@unicaen.fr

Viwanou Hounkpati viwanou.hounkpati@unicaen.fr

Germain Clavier germain.clavier@unicaen.fr

Lieu

Alençon

Les semi-conducteurs III-V tels que les nitrures de gallium ou d'indium présentent des propriétés très intéressantes pour émettre et détecter de la lumière, en raison notamment de leurs bandes énergétiques interdites allant de l'ultra-violet à l'infrarouge. À ce titre, ils sont prometteurs pour de nombreuses applications industrielles et scientifiques.

Expérimentalement, l'étude de l'irradiation par ions lourds des III-V est menée au CIMAP depuis plusieurs années pour étudier les mécanismes de formation des traînées amorphes et des défauts qui affectent les matériaux. Ces mécanismes sont importants pour comprendre comment l'irradiation peut affecter les propriétés de conduction et les propriétés mécaniques des matériaux, par exemple dans l'espace [1].

La simulation moléculaire peut apporter des éléments permettant de comprendre les mécanismes de formation de ces traînées et de recristallisation des matériaux irradiés [2]. À large échelle, les modèles tels que les simulations à deux températures essaient de simuler la dynamique électronique dans les métaux lors de fortes augmentations de température. À plus fine échelle, la simulation quantique permet d'étudier l'évolution du nuage électronique local autour des défauts, notamment des vides créés par les atomes ne reprenant par leur place lors des irradiations [3]. Si les mécanismes de stabilité de ces vides étaient élucidés, ces derniers pourraient être de bons candidats pour créer des qubits stables, utilisables pour les ordinateurs quantiques.

L'objectif du stage est de généraliser l'étude des structures III-V par dynamique moléculaire d'une part à l'aide des modèles 2 températures, d'autre part à l'aide des outils de simulation quantique (selon le profil et les compétences du stagiaire). Les logiciels utilisés implémentant ces méthodes sont notamment LAMMPS et Quantum Espresso, déjà utilisés au laboratoire.

Le profil recherché serait un étudiant en fin de Master 2 ou d'école d'ingénieur dont le parcours serait orienté physique, chimie ou science des matériaux et avec un intérêt certain pour la simulation numérique.

Le stage serait d'une durée de 4 à 6 mois et pourrait être prolongé par une thèse si le profil du candidat le permet. Il aurait lieu sur le site d'Alençon du CIMAP (Basse-Normandie, Orne).

Compétences recherchées :

- Physique statistique, science des matériaux, chimie physique
- Outils numériques : Shell, C++, Python
- Modélisation moléculaire : LAMMPS, Ovito, Quantum Espresso

[1] <https://doi.org/10.1007/s10853-015-9069-y>

[2] <https://doi.org/10.1038/s42005-021-00550-2>

[3] <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.10.136>