

## Études à l'échelle atomique dans GaN

**Contact :** Damien CALISTE DRF//INAC/MEM/L\_SIM [damien.caliste@cea.fr](mailto:damien.caliste@cea.fr) +33 4 38 78 35 18

**Stage pouvant se poursuivre en thèse :** Oui

### Résumé :

Le laboratoire L\_Sim propose un stage sur l'étude des défauts dans GaN. À l'aide de calculs DFT, le candidat se penchera sur la stabilité et les divers configurations possibles du Mg dans GaN.

### Sujet détaillé :

Le laboratoire L\_Sim à l'Université Grenoble Alpes propose un stage de master en sciences des matériaux. L\_Sim est un groupe de simulation numérique spécialisé dans l'étude des matériaux à l'échelle atomique et travaille en collaboration avec les expérimentateurs de l'institut ou des partenaires industriels.

Les effets physiques dans les semi-conducteurs ont souvent pour origine les défauts, avec des effets bénéfiques (comme dans le cas du dopage) ou néfastes (dans celui des centres recombinants par exemple). La simulation numérique à l'échelle atomique permet de mieux comprendre la physique à l'origine des effets observés. Elle apporte aussi un éclairage sur la chimie présente dans les liaisons formées avec le matériau hôte.

GaN est le substrat utilisé dans les diodes UV et est souvent dopé avec du Mg ou du Si. Actuellement, il est difficile d'obtenir de haut niveau de dopage avec le Mg. Nous nous intéressons aux raisons fondamentales de cette limitation. Est-elle due à une hybridation particulière entre le Mg et les azotes ? Le Mg vient-il se placer en position interstitiel ? L'objectif principal du stage sera de se poser ces questions au travers du prisme de la simulation numérique.

Le stage pourra durer de 4 à 6 mois, à partir du printemps 2018. Le candidat devra avoir de solides bases en physique du solide et en physique quantique. Une connaissance des outils numériques n'est pas nécessaire, mais sera un plus. À la fin du stage, le candidat aura une bonne expérience de la DFT et du calcul sur de larges machines. Par ailleurs, il aura acquis un certain regard sur les matériaux III-V.

Si le candidat est intéressé par la recherche académique et par le sujet des défauts dans les semi-conducteurs, une thèse pourra être proposée à la suite du stage.

### Compétences requises :

physique quantique, physique du solide