

# Sujets de Master 2019



- [1] A predictive simulation stack for the elements of a semiconducting quantum computer
- [2] Effet des interactions sur les propriétés topologiques de jonctions Josephson multiterminales
- [3] Étude théorique des systèmes magnétocaloriques avancés
- [4] Isolants topologiques d'ordre supérieur (Théorie)
- [5] Supraconductivité topologique p-wave, spin-triplet, dans les supraconducteurs ferromagnétiques
- [6] Transport quantique dans les matériaux topologiques
- [7] Etude des hétéro-déformations dans les couches de graphène tournées
- [8] Nanostructures hybrides Supraconducteur / Semiconducteur à base de Germanium pour l'information quantique
- [9] Development of AlGa<sub>N</sub> nanostructures for electron-pumped UV light emitting devices
- [10] Contribution to the fabrication of an electron-pumped UV laser
- [11] Croissance par épitaxie par jets moléculaires et caractérisation optique de GaN sur substrat de graphène/GaN
- [12] Réalisation de LEDs dans le visible sur substrat à polarité contrôlée
- [13] Analyse et contrôle de bactéries par microcavité optique

## A predictive simulation stack for the elements of a semiconducting quantum computer

Contact : Xavier WAIN TAL   DRF//INAC/PHELIQS/GT   xavier.waintal@cea.fr   0438780327

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

### Résumé :

After being an object of studies for a few decades, quantum nanoelectronics is now moving forward to become the basis on which the first quantum computer could be build. The challenge is immense and even the most basic questions ? such as what should be the actual physical implementation of the quantum bits (qubit) ? do not have definite answers yet. The Grenoble community is actively following several experimental leads including GaAs/GaAlAs based spin or charge qubits, Silicon CMOS based qubits, superconducting qubits or flying qubits.

The transition from quantum science to quantum technology necessitates the ability to perform predictive simulations of the quantum devices that are reliable enough to be used as a basis for exploring new ideas as well as optimization. The theory group of Pheliqs at CEA Grenoble has been developing numerical tools for this purpose that include the open source Kwant platform , (<http://kwant-project.org>) and its various extensions to deal with real time dynamics, correlations and electrostatics.

In this internship we will setup a model for predicting the characteristics of semiconducting quantum devices. Our chief concern will be a systematic comparison of our predictions with tailor made experiments that will be performed in the group of C. Bauerle at institute Néel, CNRS Grenoble. We will in particular carefully model the residual disorder present in these samples that, although small, can have a decisive impact on quantum dynamics. If times allows, we will implement machine learning algorithms to optimize the sample behavior.

The work will involve theoretical / formalism aspects (out of equilibrium many-body formalism, Feynman diagrams?), numerics (using modern approaches based on Python) and the modelisation of concrete physical systems. The internship will take place within the theory group of CEA Grenoble, INAC, PHELIQS (Photonics NanoElectronics and Quantum engineering). Our group contains 15-20 researchers working on nanoelectronics, superconductivity, magnetism and electronic correlations in close collaboration with experimental groups. The project will be done under the direction of Christoph Groth ([christoph.groth@cea.fr](mailto:christoph.groth@cea.fr)) and Xavier Waintal ([xavier.waintal@cea.fr](mailto:xavier.waintal@cea.fr)).

We seek highly motivated students with a strong background in theoretical physics, quantum nanoelectronics and/or numerical simulations.

### Sujet détaillé :

After being an object of studies for a few decades, quantum nanoelectronics is now moving forward to become the basis on which the first quantum computer could be build. The challenge is immense and even the most basic questions ? such as what should be the actual physical implementation of the quantum bits (qubit) ? do not have definite answers yet. The Grenoble community is actively following several experimental leads including GaAs/GaAlAs based spin or charge qubits, Silicon CMOS based qubits, superconducting qubits or flying qubits.

The transition from quantum science to quantum technology necessitates the ability to perform predictive simulations of the quantum devices that are reliable enough to be used as a basis for exploring new ideas as well as optimization. The theory group of Pheliqs at CEA Grenoble has been developing numerical tools for this purpose that include the open source Kwant platform , (<http://kwant-project.org>) and its various extensions to deal with real time dynamics, correlations and electrostatics.

In this internship we will setup a model for predicting the characteristics of semiconducting quantum devices. Our chief concern will be a systematic comparison of our predictions with tailor made experiments that will be performed in the group of C. Bauerle at institute Néel, CNRS Grenoble. We will in particular carefully model the residual disorder present in these samples that, although small, can have a decisive impact on quantum dynamics. If times allows, we will implement machine learning algorithms to optimize the sample behavior.

The work will involve theoretical / formalism aspects (out of equilibrium many-body formalism, Feynman diagrams?), numerics (using modern approaches based on Python) and the modelisation of concrete physical systems. The internship will take place within the theory group of CEA

Grenoble, INAC, PHELIQS (Photonics NanoElectronics and Quantum engineering). Our group contains 15-20 researchers working on nanoelectronics, superconductivity, magnetism and electronic correlations in close collaboration with experimental groups. The project will be done under the direction of Christoph Groth ([christoph.groth@cea.fr](mailto:christoph.groth@cea.fr)) and Xavier Waintal ([xavier.waintal@cea.fr](mailto:xavier.waintal@cea.fr)).

We seek highly motivated students with a strong background in theoretical physics, quantum nanoelectronics and/or numerical simulations.

**Compétences requises :**

theoretical physics, quantum nanoelectronics and/or numerical simulations

## Effet des interactions sur les propriétés topologiques de jonctions Josephson multiterminales

Contact : Manuel HOUZET DRF//INAC/PHELIQS/GT [manuel.houzet@cea.fr](mailto:manuel.houzet@cea.fr) 0438789044

Stage pouvant se poursuivre en thèse : Oui

### Résumé :

Les matériaux topologiques sont des phases de la matière condensée qui admettent des états topologiquement protégés à leurs bords. Une voie prometteuse pour les réaliser consiste à combiner différents matériaux conventionnels pour obtenir des hétérostructures présentant ces propriétés. Une alternative consiste à étudier des jonctions Josephson multiterminales formées entre des supraconducteurs conventionnels. Par exemple, des jonctions à 4 terminaux peuvent admettre des états liés topologiquement protégés à énergie nulle et qui réalisent ce qu'on appelle des singularités de Weyl. Leur existence peut être révélée grâce à une transconductance quantifiée, comme dans l'effet Hall quantique, mais en absence de champ magnétique. Le but du projet sera d'explorer cette idée récente en étudiant d'un point de vue théorique la robustesse de cette prédiction en présence de répulsion Coulombienne à l'intérieur de la jonction. En particulier, la présence de singularités de Weyl sera analysée dans un modèle concret d'îlots quantiques connectés à des supraconducteurs.

### Sujet détaillé :

Les phases topologiques de la matière suscitent actuellement beaucoup d'intérêt. L'existence d'isolants topologiques a été démontrée par plusieurs expériences récentes [1]. Les premières signatures de l'existence de semi-métaux de Weyl ont aussi été obtenues [2]. En revanche, il n'existe pas encore d'expérience concluante sur l'existence de supraconducteurs topologiques. Une direction prometteuse pour la découverte de telles phases topologiques consiste à former des hétérostructures aux propriétés exotiques en combinant différents matériaux conventionnels [3].

Comme nous l'avons prédit récemment, une jonction Josephson à plusieurs terminaux peut être considérée comme un matériau topologique [4]. En effet, il existe une connexion intime entre l'effet Josephson - un courant non dissipatif circulant entre deux supraconducteurs séparés par une interface - et la formation d'états liés d'Andreev localisés au voisinage de cette interface et dont l'énergie est plus petite que le gap supraconducteur. La topologie nous apprend qu'il y a plus d'information dans les fonctions d'onde que dans le spectre [5]. C'est aussi le cas pour les états d'Andreev. En particulier, nous avons montré que des jonctions Josephson à  $n$  terminaux supraconducteurs peuvent fournir une réalisation simple de matériaux topologiques ajustables en  $n-1$  dimensions. En particulier, pour  $n \geq 4$ , le spectre d'Andreev de la jonction peut admettre des singularités de Weyl dans l'espace des  $n-1$  différences de phases supraconductrices indépendantes, qui jouent le rôle de quasi-impulsions de la structure de bande. Ces singularités de Weyl correspondent à des états liés topologiquement protégés d'énergie nulle.

Dans des jonctions Josephson à plusieurs terminaux, la présence de singularités de Weyl autorise des transitions topologiques qui pourraient se manifester expérimentalement par des changements de la transconductance quantifiée en unités de  $4e^2/h$  entre deux terminaux polarisés en tension. La quantification de la transconductance sonde le premier nombre de Chern dans un sous-espace à deux dimensions de l'espace des  $n-1$  phases. Il s'agit donc d'un effet similaire à l'effet Hall quantique entier.

Le but du projet sera d'explorer davantage l'idée théorique introduite dans notre travail et de préciser les conditions pour son observabilité. En particulier, on étudiera la robustesse de cette prédiction dans un modèle spécifique d'une jonction à 4 terminaux faiblement couplés à un petit nombre de niveaux discrets dans un îlot quantique. On commencera par étudier les conditions pour l'apparition et la fusion de points de Weyl en l'absence d'interaction. On examinera ensuite quelles modifications du spectre peuvent être attendues en présence de répulsion Coulombienne locale. Suite à la suggestion récente de l'émergence de parafermions induits par les interactions dans des jonctions entre 2 terminaux supraconducteurs topologiques [6], on étudiera si un effet Hall quantique fractionnaire pourrait être envisagé dans une jonction à 4 terminaux.

A long terme, la relative simplicité des jonctions Josephson topologiques à plusieurs terminaux pourrait être importante pour des applications en ingénierie quantique avec des dispositifs supraconducteurs. En effet, la nature topologique des effets étudiés pourrait conduire à des applications dans les domaines de l'information quantique topologiquement protégée, ainsi que de la métrologie.

- [1] M.Z. Hasan and C.L. Kane, Rev. Mod. Phys. 82, 3045 (2010), <http://arxiv.org/abs/1002.3895>
- [2] S.Y. Xu et al., Science 349, 613 (2015), <http://arxiv.org/abs/1502.03807>
- [3] J. Alicea, Rep. Prog. Phys. 75, 076501 (2012), <http://arxiv.org/abs/1202.1293>
- [4] R.-P. Riwar, M. Houzet, J.S. Meyer, and Yu. V. Nazarov, Nature Commun. 7, 11167 (2016), <http://arxiv.org/abs/1503.06862>
- [5] M. Nakahara, ?Geometry, Topology and Physics?, IOP Ed.
- [6] Fan Zhang and C.L. Kane, Phys. Rev. Lett. 113, 036401 (2014), <http://arxiv.org/abs/1404.1072>

voir aussi: [http://inac.cea.fr/en/Phoce/Vie\\_des\\_labos/Ast/ast.php?t=fait\\_marquant&id\\_ast=1172](http://inac.cea.fr/en/Phoce/Vie_des_labos/Ast/ast.php?t=fait_marquant&id_ast=1172)

**Compétences requises :**

Le projet proposé utilisera principalement les méthodes analytiques de la théorie des champs appliquée à la physique de la matière condensée. Il pourra aussi comporter des aspects numériques.

Les candidats intéressés auront de bonnes bases en mécanique quantique, physique statistique et physique du solide.

## Étude théorique des systèmes magnétocaloriques avancés

Contact : Mike ZHITOMIRSKI DRF//INAC/PHELIQS/GT [mike.zhitomirsky@cea.fr](mailto:mike.zhitomirsky@cea.fr) 04 38 78 43 30

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

### Résumé :

Un champ magnétique externe affecte l'entropie d'un système magnétique et provoque des variations de température qui peuvent être utilisées pour la réfrigération magnétique. Une technologie de refroidissement alternative de ce type est de plus en plus importante aujourd'hui pour les télescopes spatiaux, les expériences en physique des particules et l'informatique quantique. A ce moment, la plupart des réfrigérateurs de démagnétisation adiabatique utilisent des sels paramagnétiques qui ont une capacité limitée pour des températures supérieures à 1 K. Récemment, deux nouvelles familles de matériaux magnétocaloriques adaptées aux applications dans la gamme de température 1-4 K ont été proposées: systèmes de spin à géométrie frustrée et aimants dipolaires. Nous envisageons d'étudier les propriétés magnétocaloriques de ces matériaux en utilisant des Monte Carlo simulations de modèles de spin réel approprié pour les matériaux connus, tel que  $Gd_3Ga_5O_{12}$  et  $GdLiF_4$ , ainsi que pour les matériaux magnétocaloriques prospectifs,  $Yb_2Ti_2O_7$  et  $Yb_3Ga_5O_{12}$ . L'étude théorique bénéficiera d'une collaboration proche avec les études expérimentales en cours à l'INAC.

### Sujet détaillé :

Les simulations informatiques jouent un rôle de plus en plus important dans la façon dont les scientifiques acquièrent des connaissances sur la Nature. Les méthodes de Monte Carlo développées au cours des 50 dernières années ont révolutionné le domaine de la Physique Statistique. Initialement utilisés pour étudier que des modèles simples idéaux, les techniques modernes de Monte Carlo peuvent être appliquées à des systèmes physiques réels. Ce projet se concentre sur l'étude théorique des propriétés magnétocaloriques pour quelques matériaux magnétiques. Parallèlement à la recherche fondamentale, cette enquête comporte une importante composante appliquée liée au domaine de la réfrigération magnétique à basse température.

La performance actuelle des réfrigérateurs de démagnétisation adiabatique est déterminée par la température de l'ordonnement du matériau réfrigérant. Par conséquent, les propriétés magnétocaloriques peuvent être améliorées en utilisant des matériaux magnétiques avec des réseaux dits frustrés, dont la géométrie empêche un simple ordre magnétique. Dans le passé, nous avons développé l'algorithme Monte Carlo hybride très efficace et l'utilisé pour étudier diverses propriétés d'aimants géométriquement frustrés. La première tâche à résoudre par un étudiant sur ce projet est de développer un code informatique pour des réseaux avec un remplissage partiel de sites magnétiques. Le code modifié sera utilisé pour étudier l'effet de la dilution non magnétique sur les propriétés magnétocaloriques en vue d'optimiser les propriétés magnétocaloriques des systèmes réels. Une étude fondamentale complémentaire sera consacrée à l'ordre de désordre' effets dans des aimants frustrés dilués, qui consiste à sélectionner des types exotiques d'ordre magnétique dans des aimants dégénérés et frustrés uniquement par le désordre structurel.

Une autre classe de solides magnétiques avec l'ordonnance faible inclut des matériaux avec des interactions d'échange réduites comme dans  $GdLiF_4$ . Pourtant, les interactions dipôle-dipôle entre les ions magnétiques sont toujours présentes et affectent les propriétés du matériau. Les matériaux de ce type ont un excellent potentiel technologique pour la réfrigération magnétique. Pour découvrir ce potentiel, il faut compétement comprendre leurs propriétés physiques de base. La tâche de l'étudiant inclut les calculs analytiques des états magnétiques basiques possibles pour aimant dipolaire dans les champs magnétiques zéro et dans les champs magnétiques appliqués se concentrant sur  $GdLiF_4$ . En plus, les codes de Monte Carlo doivent être modifiés pour tenir compte de propriété de longue distance des interactions dipolaires. Ceux-ci seront utilisés pour l'étude théorique des transitions de phase et des diagrammes de phase dans l'aimants dipolaires des deux et trois dimensions.

### Compétences requises :

Bases de programmation et de physique des solides

## Isolants topologiques d'ordre supérieur (Théorie)

Contact : Julia MEYER DRF//INAC/PHELIQS/GT [julia.meyer@cea.fr](mailto:julia.meyer@cea.fr) 04 38 78 31 46

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

### Résumé :

Les isolants topologiques sont des matériaux isolants en volume, mais qui hébergent des états de surface conducteurs topologiquement protégés. Très récemment, des isolants topologiques d'ordre supérieur dans lesquels les états conducteurs vivent dans deux dimensions de moins que le volume ont été prédits. Des indications expérimentales de tels modes de "charnière" ont récemment été trouvées dans le Bismuth. Dans ce stage, nous souhaitons explorer les différences entre les états de bord unidimensionnels d'un isolant topologique bidimensionnel et les modes de charnière d'un isolant topologique d'ordre supérieur tridimensionnel.

### Sujet détaillé :

Les isolants topologiques sont des matériaux isolants en volume, mais qui hébergent des états de surface conducteurs topologiquement protégés. C'est le cas de l'isolant de (spin) Hall quantique bidimensionnel qui possède des canaux de bord unidimensionnels robustes. Très récemment, des isolants topologiques d'ordre supérieur dans lesquels les états conducteurs vivent dans deux dimensions de moins que le volume ont été prédits. Par exemple, un système tridimensionnel peut avoir un volume et des surfaces isolants, mais des modes de «charnière» unidimensionnels topologiquement protégés (voir illustration). Des indications expérimentales de tels modes de charnière ont récemment été trouvées dans le Bismuth [2]. Dans ce stage, nous souhaitons explorer les différences entre les états de bord unidimensionnels d'un isolant topologique bidimensionnel et les modes de charnière d'un isolant topologique d'ordre supérieur tridimensionnel [3]. Nous étudierons en particulier leur couplage avec des supraconducteurs dans des jonctions Josephson. De plus, nous examinerons l'effet du désordre et un éventuel couplage aux états volumiques / de surface résiduels.

[1] W.A. Benalcazar et al., Science 357, 61 (2017).

[2] F. Schindler et al., Nat. Phys. 14, 918 (2018).

[3] R. Queiroz et A. Stern, preprint arXiv:1807.04141.

### Compétences requises :

Le projet proposé utilisera principalement les méthodes analytiques de la théorie des champs appliquée à la physique de la matière condensée. Il pourra aussi comporter des aspects numériques. Les candidats intéressés auront de bonnes bases en mécanique quantique, physique statistique et physique du solide.

## Supraconductivité topologique p-wave, spin-triplet, dans les supraconducteurs ferromagnétiques

Contact : Jean-pascal BRISON DRF//INAC/PHELIQS/IMAPEC [jean-pascal.brison@cea.fr](mailto:jean-pascal.brison@cea.fr) 0438785248

Stage pouvant se poursuivre en thèse : Oui

### Résumé :

Ce projet de M2, appelé à se poursuivre en thèse, est centré sur une famille particulière de supraconducteurs à fortes corrélations électroniques, qui sont des supraconducteurs de type « triplet de spin/p-wave ». Cet état est rare mais très recherché (voir la quête des fermions de Majorana). Ce sont des systèmes à base d'uranium (URhGe, UCoGe), qui sont aussi des supraconducteurs ferromagnétiques : ces 2 systèmes deviennent tout d'abord ferromagnétiques vers 9K ou 3K respectivement, avant de devenir supraconducteur (en restant ferromagnétique), respectivement en dessous de 0.25K ou 0.5K.

Aujourd'hui, ils sont sans doute les meilleurs systèmes pour explorer l'appariement triplet : cet état triplet est admis sans contestation, et on sait en obtenir des cristaux très purs. Ce projet vise à connaître beaucoup plus en profondeur ce paramètre d'ordre p-wave (le « vecteur d »). Durant le stage, on abordera 2 points :

? L'exploration du couplage du vecteur d avec le champ magnétique, qui conduit à une supraconductivité ré-entrante (ou renforcée), par des mesures de dilatation thermique.

? La détermination des conditions d'observation des propriétés topologiques de l'état supraconducteur, par mesure d'effet Hall thermique.

Toutes les mesures seront effectuées dans des cryostats à dilution, sur des cristaux synthétisés dans le groupe. On bénéficie aussi d'un fort support théorique en interne.

### Sujet détaillé :

La supraconductivité est un sujet particulièrement vivant en matière condensée, notamment grâce à la découverte continue de nouvelles familles de supraconducteurs qui bouleversent notre compréhension de ce phénomène. La plupart de ces nouvelles familles de supraconducteurs sont aussi des systèmes à fortes corrélations électroniques, comme les cuprates à Haut-Tc, les pnictures de fer, les fermions lourds? Ils partagent les mêmes questions centrales sur leur état normal ou leurs phases supraconductrices, comme l'origine du mécanisme d'appariement qui est dominé par les interactions électron-électron plutôt que par le couplage électron-phonon. Mais on a aussi réalisé dernièrement, que cette supraconductivité non-conventionnelle pouvait aussi avoir des propriétés topologiques particulières, liées à la structure de bande ou à la structure des n?uds du gap supraconducteur.

Ce projet de M2, appelé à se poursuivre en thèse, est centré sur une famille particulière de supraconducteurs à fortes corrélations électroniques, qui sont des supraconducteurs de type « triplet de spin/p-wave ». Cet état est rare mais très recherché (voir la quête des fermions de Majorana). Ce sont des systèmes à base d'uranium (URhGe, UCoGe pur ce projet), qui sont aussi des supraconducteurs ferromagnétiques : ces 2 systèmes deviennent tout d'abord ferromagnétiques vers 9K ou 3K respectivement, avant de devenir supraconducteur (en restant ferromagnétique), respectivement en dessous de 0.25K ou 0.5K.

De plus, dans les 2 systèmes, la supraconductivité semble renforcée sous champ magnétique, contrairement à la situation de tous les autres composés supraconducteurs : ce renforcement apparaît pour les valeurs de champ magnétique qui coïncident avec la suppression de l'ordre ferromagnétique (voir figure).

Aujourd'hui, ils sont sans doute les meilleurs systèmes pour explorer l'appariement triplet : cet état triplet est admis sans contestation, et on sait obtenir des cristaux très purs de ces composés d'uranium. Le projet de M2 vise à connaître beaucoup plus en profondeur ce paramètre d'ordre p-wave (le « vecteur d »). Durant le stage, on abordera 2 points :

? L'exploration du couplage du vecteur d avec le champ magnétique, qui conduit à une supraconductivité ré-entrante (ou renforcée), par des mesures de dilatation thermique.

? La détermination des conditions d'observation des propriétés topologiques de l'état supraconducteur, par mesure d'effet Hall thermique.

Grâce à la dilatation thermique, on va explorer l'état supraconducteur sous champ avec une précision inégalée : on s'attend à ce que le vecteur d évolue fortement dans la région de supraconductivité renforcée, sans doute même avec de vraies transitions de phase entre différents états supraconducteurs.



L'effet Hall thermique, quant à lui, est une sonde très sensible des excitations de basse énergie : or justement, il est prédit qu'UCoGe serait un supraconducteur « de Weyl », possédant des nœuds du gap le long de l'axe de facile aimantation, et des excitations chirales. On attend aussi des excitations de surface de très basse énergie, qui seraient concentrées dans les parois de domaines chiraux.

Toutes les mesures seront effectuées dans des cryostats à dilution, sur des cristaux synthétisés dans le groupe. On bénéficie aussi d'un fort support théorique en interne.

**Compétences requises :**

Goût pour l'instrumentation, la physique expérimentale, la physique quantique, capacité à discuter avec des théoriciens et à s'attaquer à des problèmes complexes.

## Transport quantique dans les matériaux topologiques

Contact : Georg KNEBEL DRF//INAC/PHELIQS/IMAPEC [georg.knebel@cea.fr](mailto:georg.knebel@cea.fr) 0438783951

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

### Résumé :

Le but principal du stage est de comprendre au niveau fondamental les différents phénomènes non conventionnels qui sont présents dans les semimétaux topologiques 3D récemment découverts à l'aide d'études expérimentales originales. Ainsi, le stagiaire sera impliqué dans les mesures de caractérisation (résistivité, pouvoir thermoélectrique, chaleur spécifique?) à très basse température et haut champ magnétique, l'analyse des données, et dans l'amélioration du dispositif expérimental. Il pourra aussi collaborer avec les autres personnes du laboratoire qui font des mesures complémentaires sur ces mêmes composés et il pourra être amené à réaliser des expériences sur grands instruments (LNCMI?).

### Sujet détaillé :

Conventionnellement, la théorie des bandes classe les matériaux comme des isolants, des semiconducteurs ou des métaux se basant sur la présence (ou non) et sur la taille d'un gap d'énergie entre la bande de conduction et la bande de valence. Les semi-métaux sont des métaux qui se situent entre les semiconducteurs et les métaux. Ils se caractérisent par un faible recouvrement en énergie entre la bande de valence et la bande de conduction à des points particuliers de la zone de Brillouin, l'exemple le plus connu étant le graphène (2D). L'équivalent en 3D du graphène est le semi-métal topologique regroupant le semi-métal de Dirac ( $\text{Cd}_3\text{As}_2$ ,  $\text{Na}_3\text{Bi}$ ?) et le semi-métal de Weyl ( $\text{TaAs}$ ,  $\text{NbAs}$ ?). Les points particuliers de la zone de Brillouin pour lesquels les bandes de conduction et de valence se touchent s'appellent des nœuds de Weyl (ou points de Dirac). La dispersion de l'énergie en fonction du vecteur d'onde électronique  $k$  près de ces points est linéaire dans les trois directions d'espace formant des cônes de Dirac. La richesse de ces matériaux vient de la présence de ces nœuds de Weyl autour desquels la fonction d'onde électronique va acquérir une phase exotique de nature topologique ou phase de Berry. Les aspects topologiques des matériaux sont très recherchés actuellement car ils sont à l'origine de phénomènes nouveaux comme les états de surface topologiques et qu'ils pourraient être utilisés pour de futures applications dans le transport quantique et la spintronique. Le but principal de la thèse est de comprendre au niveau fondamental les différents phénomènes non conventionnels qui sont présents dans les semi-métaux topologiques 3D à l'aide d'études expérimentales originales. Il est envisagé de donner la possibilité au thésard de réaliser ses propres cristaux car le laboratoire dispose d'un service de cristallogenèse très performant. Il est aussi prévu, de réaliser des couches minces de ces matériaux en collaboration. La pression uniaxiale ou hydrostatique va être utilisée pour ajuster le niveau de Fermi. Ainsi, le thésard sera impliqué dans les mesures de caractérisation (résistivité, pouvoir thermoélectrique, chaleur spécifique?) à très basse température et haut champ magnétique, l'analyse des données, et dans l'amélioration du dispositif expérimental. Pour atteindre la limite quantique des expériences à très hauts champs magnétiques dans le laboratoire LNCMI à Grenoble et Toulouse sont nécessaires.

### Compétences requises :

Goût pour l'instrumentation, la physique expérimentale, la physique du solide

## Etude des hétéro-déformations dans les couches de graphène tournées

Contact : Vincent RENARD DRF//INAC/PHELIQS/LATEQS [vincent.renard@cea.fr](mailto:vincent.renard@cea.fr) 0438786225

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

### Résumé :

De nouveaux états de la matière liées à une forte interaction électron-électron (supraconductivité, isolant de Mott) ont récemment été observés dans des empilement de graphène où il existe une rotation entre les couches. A un angle bien particulier dit "magique" l'interaction électron-électron est en effet fortement augmentée dans ce système. C'est un résultat important car cela constitue le premier système formé entièrement et uniquement de carbone pour lequel cette physique apparaît. Nous avons récemment montré que les propriétés électroniques de ce type de système dépendent aussi fortement des déformations relatives entre les couches de graphène, un effet que nous avons appelé heterostrain en anglais. L'objectif de ce stage qui sera poursuivi par une thèse est de contrôler et d'étudier par microscopie à effet tunnel les effets de l'heterostrain à la recherche de nouveaux états de la matière dans ce système

### Sujet détaillé :

Nous recherchons un candidat très motivé pour un stage de master suivi d'un thèse sur l'étude des hétérodéformations dans les couches de graphène empilées avec une rotation entre les couches.

Dans ces systèmes un moiré se forme en raison de la superposition des deux réseaux atomiques (voir la figure). Le potentiel qui en résulte a donné lieu à l'observation d'une grande variété de comportements électroniques: de l'observation de singularités de van Hove dont l'énergie dépend de l'angle de rotation entre les couches [1] à la localisation des électrons par le potentiel de moiré [2] en passant par la formation d'états unidimensionnels topologiquement protégés [3]. L'année 2018 a été porteuse de nombreuses découvertes dans ce système:

- 1) Observation de la supraconductivité lorsque l'angle de rotation approche un angle dit magique [4.]
- 2) Réalisation d'un quasi-cristal (symétrie de rotation mais pas de symétrie de translation) pour un angle de rotation de  $30^\circ$  [5].
- 3) Démonstration de l'effet important des déformations relatives (hétéro-déformations) sur les propriétés électriques de ces systèmes [6].

Cette dernière découverte a été faite dans notre groupe en utilisant un formalisme développé par un précédent doctorant permettant de quantifier les hétéro-déformations et en utilisant la microscopie à effet tunnel. Dans ce cas les hétéro-déformations existaient dans l'échantillon suite à la croissance du graphène. L'objet de ce projet est de contrôler les hétéro-déformations à la recherche de nouveaux états de la matière. Le candidat disposant d'une solide formation en physique de la matière condensée sera impliqué dans toutes les étapes de la recherche: fabrication des échantillons, développement du dispositif de contrôle des hétéro-déformations, études avec le STM et analyse des données. L'analyse sera faite en collaboration avec l'équipe théorique de l'université Cergy Pontoise.

### Références

- [1] G. Lucian et al. Nature Physics 6, 109 (2010)
- [2] G. T. de Laissardière et al. Nanoletters 10, 804 (2010)
- [3] S. Huang et al. Phys Rev. Lett. 121, 037702 (2018)
- [4] Y. Cao et al. Nature 556, 43 (2018)
- [5] S. J. Ahn et al. Science 361,782 (2018)
- [6] Huder et al. Phys Rev. Lett. 120, 156405 (2018)

## Nanostructures hybrides Supraconducteur / Semiconducteur à base de Germanium pour l'information quantique

Contact : Francois LEFLOCH DRF//INAC/PHELIQS/LATEQS francois.lefloch@cea.fr 0438784822

Stage pouvant se poursuivre en thèse : Oui

### Résumé :

Les trous dans le germanium ont l'avantage de présenter à la fois un très fort couplage spin-orbite, ce qui permet un contrôle rapide entièrement électrique des leurs spins, et une faible barrière Schottky avec plusieurs métaux supraconducteurs, ce qui permet la réalisation de dispositifs électroniques hybrides supraconducteur/semiconducteur. Ces propriétés restent aujourd'hui largement inexploités.

Le but de ce projet est d'étudier des nanostructures à base de gaz 2D de trous dans le germanium dans la perspective : i) d'isoler des spins individuels dans des points quantiques pour les contrôler électriquement par des grilles ii) de connecter ces nanostructures avec des électrodes supraconductrices pour faire des structures hybrides supraconducteur / semiconducteur de bonne qualité, ce qui est décisif pour un certain nombre de réalisations de qubits hybrides supraconducteurs (notamment le « GATEMON » : gate-tunable transmon).

Deux types de couches de germanium seront étudiés : des couches de Ge enterrées de haute mobilité (puits quantiques Ge avec contrainte dans une hétérostructure Ge/Ge<sub>0.8</sub>Si<sub>0.2</sub>) et des couches de Ge sur isolant (GeOI).

De plus, le couplage spin-orbite permettra d'explorer la physique des états topologiques notamment en présence de contacts supraconducteurs. Dans cette situation particulière les conditions seront réunies pour mettre en évidence et confirmer l'existence de fermions de Majorana.

Ce stage, qui pourra se continuer par une thèse, inclura du temps de nanofabrication en salle blanche avec notamment l'utilisation d'un masqueur électronique et des mesures à très basse température sur des cryostats dédiés.

### Sujet détaillé :

Les trous dans le germanium ont l'avantage de présenter à la fois un très fort couplage spin-orbite, ce qui permet un contrôle rapide entièrement électrique des leurs spins, et une faible barrière Schottky avec plusieurs métaux supraconducteurs, ce qui permet la réalisation de dispositifs électroniques hybrides supraconducteur/semiconducteur. Ces propriétés restent aujourd'hui largement inexploités.

Le but de ce projet est d'étudier des nanostructures à base de gaz 2D de trous dans le germanium dans la perspective : i) d'isoler des spins individuels dans des points quantiques pour les contrôler électriquement par des grilles ii) de connecter ces nanostructures avec des électrodes supraconductrices pour faire des structures hybrides supraconducteur / semiconducteur de bonne qualité, ce qui est décisif pour un certain nombre de réalisations de qubits hybrides supraconducteurs (notamment le « GATEMON » : gate-tunable transmon).

Deux types de couches de germanium seront étudiés : des couches de Ge enterrées de haute mobilité (puits quantiques Ge avec contrainte dans une hétérostructure Ge/Ge<sub>0.8</sub>Si<sub>0.2</sub>) et des couches de Ge sur isolant (GeOI).

De plus, le couplage spin-orbite permettra d'explorer la physique des états topologiques notamment en présence de contacts supraconducteurs. Dans cette situation particulière les conditions seront réunies pour mettre en évidence et confirmer l'existence de fermions de Majorana.

Ce stage, qui pourra se continuer par une thèse, inclura du temps de nanofabrication en salle blanche avec notamment l'utilisation d'un masqueur électronique et des mesures à très basse température sur des cryostats dédiés.

### Compétences requises :

Master de Physique

## Development of AlGaIn nanostructures for electron-pumped UV light emitting devices

Contact : Eva MONROY DRF//INAC/PHELIQS/NPSC [eva.monroy@cea.fr](mailto:eva.monroy@cea.fr) 0438789068

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

### Résumé :

The student will participate in a project to develop a new concept of UV lamp based on electron pumping of AlGaIn nanostructures. Within this project, the master student will be in charge of the fabrication of AlGaIn-based nanowires emitting in the UV-B and UV-C ranges, their structural and optical characterization, comparison of the results with theoretical calculations using a commercial software, and finally comparison of the performance of such nanowire structures with quantum wells and quantum dots available in our laboratory.

### Sujet détaillé :

Our project is a contribution to the development of high-brightness, mercury-free, 100% recyclable and high-gloss UV lamps. UV disinfection is usually carried out using discharge lamps containing large quantities of mercury, a highly toxic substance strictly regulated by EU directives. The currently explored alternative consists of UV (LED UV) light emitting diodes based on AlGaIn semiconductors. However, after more than 15 years of R&D, the UV LED technology is progressing very slowly, and comparative studies show that it is still far from rivaling the mercury lamp. The performance of UV LEDs remains limited by two major problems: the high activation energy of the dopants in the AlGaIn and the diffusion length of the holes in these materials, extremely smaller than that of the electrons.

To circumvent the problems associated to the UV LED technology, we propose to pump an active region based on AlGaIn nanostructures with an electron beam. In such a configuration, electrons and holes are generated throughout the active medium with the same spatial distribution, without the need for doping or electrical contacts.

Within this project, the master student will be in charge of (i) fabrication of AlGaIn-based nanowires emitting in the UV-B and UV-C ranges, (ii) structural and optical characterization, (iii) comparison of the results with theoretical calculations using a commercial software, and (iv) comparison of the performance of such nanowire structures with quantum wells and quantum dots (available in our laboratory).

The student will be trained in the use of molecular-beam epitaxy, scanning electron microscopy, photoluminescence, cathodoluminescence and modeling of the electronic structure using the Nextnano commercial software.

### Compétences requises :

Knowledge of semiconductor physics and taste for experimental work.

## Contribution to the fabrication of an electron-pumped UV laser

**Contact :** Eva MONROY DRF//INAC/PHELIQS/NPSC [eva.monroy@cea.fr](mailto:eva.monroy@cea.fr) 0438789068

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

### Résumé :

During the internship, the student will contribute to the design of the active region of a semiconductor laser structure emitting at 350 nm. He/she will participate to the growth of test structures containing quantum wells and quantum dots as active media. He will characterize the structure by x-ray diffraction, photoluminescence and cathodoluminescence. In view of the results in terms of internal quantum efficiency and linewidth, a decision will be made on the optimum structure for the fabrication of optimized laser structures.

### Sujet détaillé :

There is a strong demand for deep-UV lasers for applications such as Lidar remote detection, non-line-of sight communication, chem-bio sensing, 3D printing, etc. This spectral range is currently covered by gas lasers or lasers based on frequency conversion, which are bulky, inefficient, and inflexible in wavelength. Laser diodes should provide an alternative solution, but their implementation is held back by the difficulties to fabricate highly-conductive p-AlGaIn cladding layers. In this project, we will develop a new compact UV-laser technology based on the excitation of AlGaIn nanostructures by a highly energetic electron beam from a carbon nanotube cathode. We target Peltier-cooled quasi-continuous-wave devices at 350 nm and 265 nm, with an average output power > 50 mW. The choice of wavelengths aims at a direct comparison with the Nd-YAG technology.

During the internship, the student will contribute to the design of the active region of the laser structure emitting at 350 nm, from the electronic and optical viewpoints. He/she will participate to the growth of test structures containing quantum wells and quantum dots as active media. He will characterize the structure by x-ray diffraction, photoluminescence and cathodoluminescence. In view of the results in terms of internal quantum efficiency and linewidth, a decision will be made on the optimum structure for the fabrication of the laser.

The student will be trained in molecular beam epitaxy, photoluminescence, cathodoluminescence, x-ray diffraction, and modelling using nextnano and comsol.

### Compétences requises :

Knowledge of semiconductor physics. Taste for experimental work on optoelectronics.

## Croissance par épitaxie par jets moléculaires et caractérisation optique de GaN sur substrat de graphène/GaN

**Contact :** Bruno DAUDIN DRF//INAC/PHELIQS/NPSC [bruno.daudin@cea.fr](mailto:bruno.daudin@cea.fr) 0438783750

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

### Résumé :

Parmi les multiples avantages du graphène, son utilisation comme substrat pour l'épitaxie des matériaux nitrures semiconducteurs est particulièrement attractive : outre le fait de permettre l'épitaxie de ces matériaux sur n'importe quel substrat, le graphène assure en effet un découplage élastique de la structure épitaxiée du substrat sous-jacent et permet de minimiser, voire de supprimer, la formation de défauts cristallins tels que les dislocations associés au désaccord de maille avec le substrat et à la nécessaire relaxation des contraintes élastiques lors de l'épitaxie. Ceci vaut bien entendu pour les semiconducteurs nitrures (GaN et alliages) qui sont à la base des LEDs blanches dont l'utilisation explose actuellement dans la mouvance de la « transition énergétique ». Dans ce contexte, nous nous proposons d'utiliser le concept de « remote epitaxy » pour faire croître du GaN d'excellente qualité. Il s'agira de déposer une couche de graphène sur un substrat de GaN épais (en collaboration avec l'équipe Systèmes Hybrides de basse dimensionnalité de l'Institut Néel) puis de réaliser sur ce substrat une reprise de croissance de GaN par épitaxie par jets moléculaires (MBE) (au laboratoire INAC/PHELIQS/NPSC du CEA-Grenoble). Du fait de la faible épaisseur du graphène (une monocouche), nous nous attendons à ce que la couche supérieure garde la « mémoire » du substrat et pousse de façon monocristalline. Mais nous nous attendons également à ce que la monocouche de graphène découple suffisamment la couche épitaxiée pour que les dislocations présentes dans le substrat ne lui soient pas transférées. L'objectif est donc d'obtenir in fine un matériau d'excellente qualité cristalline et optique et de contribuer ainsi à résoudre un problème récurrent des matériaux nitrures qui persiste en dépit des avancées internationales sur le sujet.

### Compétences requises :

goût de la science expérimentale. Curiosité. intérêt pour la science des matériaux

## Réalisation de LEDs dans le visible sur substrat à polarité contrôlée

**Contact :** Bruno DAUDIN DRF//INAC/PHELIQS/NPSC [bruno.daudin@cea.fr](mailto:bruno.daudin@cea.fr) 0438783750

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

### Résumé :

Les exceptionnelles propriétés structurales et optiques des nanofils de semiconducteurs III-V (GaN, AlN, InN et leurs alliages) en font des candidats privilégiés pour une future génération de diodes électroluminescentes (LEDs) émettant dans le visible et l'ultraviolet. La phase cristallographique de ces matériaux (wurtzite) n'est pas centro-symétrique : il en résulte que les couches épitaxiales ou les nanofils sont terminés soit par un plan d'azote soit par un plan de métal. La polarité azote étant associée à l'incorporation de défauts ponctuels, la réalisation de dispositifs efficaces à nanofils implique de travailler sur la polarité métal et de la contrôler. Sachant que les nanofils de GaN spontanément nucléés sur silicium ou sur de nombreux autres substrats présentent une polarité azote, la conversion en polarité métal est essentielle à la réalisation de LEDs optimisées. Des expériences préliminaires ont montré que cette conversion peut être effectuée à l'aide d'un traitement de surface par plasma oxygène des nanofils de GaN de polarité azote. L'objectif du stage sera de confirmer ces premiers résultats et de réaliser ensuite des structures LEDs de type GaN/InGaN et de comparer leurs propriétés optiques avec celles de LEDs élaborées en polarité azote. Le stage est à dominante expérimentale et permettra de se familiariser avec les techniques de croissance de nanofils de GaN par épitaxie par jets moléculaires (EJM), de traitement plasma, de microscopie électronique à balayage (SEM) et de cathodoluminescence. L'application visée in fine est celle de la réalisation de LEDs à nanofils sur substrats silicium de grande dimension. Une prolongation en thèse est possible

### Compétences requises :

goût pour la science expérimentale



## Analyse et contrôle de bactéries par microcavité optique

**Contact :** Emmanuel PICARD DRF//INAC/PHELIQS/SINAPS [emmanuel.picard@cea.fr](mailto:emmanuel.picard@cea.fr) 0438789097

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

### Résumé :

Les structures nanophotoniques en silicium permettent de concentrer fortement la lumière. On obtient ainsi un champ électromagnétique très intense capable d'attirer une bactérie et de la piéger. Cette dernière est ensuite identifiée par analyse des fluctuations de l'intensité lumineuse transmise par la structure optique. Ce dispositif encore en phase de développement a permis de distinguer trois types de bactéries en quelques secondes. Ce stage s'inscrit dans la continuité de cette étude, où nous souhaitons étudier non seulement d'autres bactéries mais aussi étudier le comportement de celles-ci en fonction d'agents extérieurs (vie et mort de la cellule, effet d'un antibiotique, effet de la température).

### Sujet détaillé :

La pression de radiation est la force exercée par la lumière lorsqu'elle rencontre ou traverse un objet. Cette force si petite soit-elle peut permettre de déplacer ou manipuler, à la manière d'une mini pince, des objets de dimension micrométrique. Généralement mise en œuvre au travers d'un microscope, on parle alors de pince optique.

Le laboratoire a une longue expérience dans l'étude des microcavités à cristaux photoniques. Il y a été démontré que les microcavités optiques dans la filière SOI (Silicon On Insulator) permettent de réaliser un confinement extrêmement efficace du champ électromagnétique, tant du point de vue spectral que spatial. La mise en évidence et la quantification des forces optiques (pression de radiation et gradient) générées par ces microcavités a été obtenue par l'observation du mouvement de particules micrométriques placées en solution à proximité des structures. Il a pu ainsi être démontré que ces systèmes optofluidiques permettent le piégeage, l'assemblage, la manipulation et le tri de micro-nano objets en suspension. Nous avons franchi une étape supplémentaire en réussissant à identifier une bactérie piégée grâce à sa signature optique.

Dans le cadre de ce sujet de master, nous envisageons de poursuivre ces études en évaluant les potentialités de ces technologies optofluidiques dans le domaine de la biologie cellulaire. Une première étape sera de faire évoluer les composants vers un système intégré permettant de conserver une viabilité cellulaire compatible avec les contraintes des mesures spectroscopiques. L'objectif final de ce stage sera de proposer un système optofluidique silicium permettant d'analyser et/ou contrôler dynamiquement le comportement d'une cellule en fonction d'agent extérieur (antibiotique, chaleur, nourriture). Les travaux seront conduits en collaboration avec les équipes spécialisées dans les technologies du vivant et de la santé.

### Publications récentes

R. Therisod, M. Tardif. et al. Gram-type differentiation of bacteria with 2D hollow photonic crystal cavities. Appl. Phys. Lett. 113, 111101 (2018)

Tardif, M. et al. Single-cell bacterium identification with a SOI optical microcavity. Appl. Phys. Lett. 133510, (2016).

### Compétences requises :

Physique, optique, microbiologie