

## **MASTER Sciences et Technologies** *Mention "Microélectronique & Nanoélectronique"*

### SUJET DE STAGE 2011 – 2012

#### *Spécialité Recherche « Dispositifs de la Nanoélectronique »*

<b>Laboratoire</b>	IM2NP, faculté des sciences de Saint-Jérôme, Aix-Marseille Université
<b>Responsable du stage</b> (nom, titre, e-mail)	Vincent OISON Maître de conférences vincent.oison@im2np.fr 04 91 28 90 38
<b>Sujet de stage</b>	Étude ab initio des propriétés de la surface de ZnO
<b>Objectifs du stage</b>	<p>Ce travail s'intègre dans l'ANR P2N « MOON » pour les années 2012-2015. Nous étudions la croissance de films minces et de nanofils d'oxyde de zinc ZnO dans le but d'optimiser les propriétés de cet oxyde dans le domaine de la conversion d'énergie solaire ou dans celui de la nanoélectronique. Le volet simulation numérique ab initio présente de multiples facettes : études de l'interface Saphir/ZnO, des reconstructions de surface de ZnO, du comportement thermodynamique du précurseur organo-métallique et de son interaction avec la surface... Notons que ZnO est aussi utilisé pour des applications capteur de gaz.[1]</p> <p>L'objectif du stage est l'étude des propriétés de la surface de ZnO et de ses reconstructions. Nous utilisons le code de simulations numériques ab initio VASP[2] qui donne accès aux énergies et géométries d'équilibre des surfaces, mais aussi à la structure électronique du matériau. La connaissance des énergies de formation et de migration des défauts ponctuels est une donnée essentielle pour l'étude de la croissance du film de ZnO. L'étude de ces défauts pourrait être abordé brièvement durant le stage. La discussion scientifique des résultats implique une interaction avec l'équipe « Contraintes mécaniques dans des objets de petites dimensions » de l'IM2NP (animée par O. Thomas) qui se charge du volet expérimental de l'étude au sein de l'IM2NP.</p> <p>[1] Q. Yuan, Y.-P. Zhao, L. Li, T. Wang, J. Phys. Chem. C, <b>2009</b>, 113, 6107.          [2] <a href="http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp">http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp</a></p>
<b>Pré-requis</b>	Notions de langage informatique (par exemple Fortran ou de C) Notions de physique et/ou chimie quantique Bases de la physique du solide et des semiconducteurs
<b>Financement</b>	~400 euros/mois (durée 5 mois)
<b>Poursuite en thèse</b>	

