

Ecole Doctorale des Sciences Fondamentales

SUJET DE THESE

Titre de la thèse : Calculs Ab Initio DFT renseignant sur les propriétés et réactions de composés III-V et III-N semi-conducteurs (nano-fils dont la croissance est effectuée au laboratoire).

Directeur de thèse : Philip E Hoggan
Unité de rattachement : Institut Pascal, UMR CNRS 6602
Equipe : Surfaces et Interfaces
Etablissement de rattachement : UCA
Courriel et téléphone : philip.hoggan@uca.fr 0473405170

:

Résume :

L'équipe d'accueil est le groupe de recherches 'Surfaces et Interfaces' de l'Institut Pascal, qui mène des projets en commun avec celle de 'Croissance cristalline'.

Le candidat effectuera un travail théorique, et bénéficiera d'un entourage scientifique essentiellement constituée d'expérimentateurs qui font croître ou caractérisent des semi-conducteurs III-V, en particulier sous forme de nano-fils.

Récemment, plusieurs publications font état d'études par l'approche orientée densité (DFT), appliquée aux systèmes périodiques, de fils 'cœur-tube' (1).

L'objectif de cette étude est de développer les calculs *ab initio* PBE (Perdew Burke Ernzerhof) sur une base d'ondes planes et les adapter à l'étude de fils sans-défaut de GaAs et GaN. Le choix de PBE est justifié par sa précision pour la géométrie et la structure de bandes de solides (2).

Le candidat utilisera le logiciel ABINIT pour la DFT/ondes planes, ainsi que l'outil de graphisme Diamond pour visualiser les entrées et sorties.

Une série de super-cellules pour modéliser les nanofils de structure blende a déjà été testée, dans le cadre d'un stage de M2. La nitruration, qui forme une couche de GaN à la surface de nano-fils de GaAs est au cœur de cette étude. Nous avons déjà montré, pour des surfaces planes de GaAs, que cette nitruration conduit à la déposition d'une couche mince de GaN et confère une passivation au solide (3).

Ecole Doctorale des Sciences Fondamentales

ABINIT tourne sur des ordinateurs parallèles, notamment au centre régional (CRRI) et national (IDRIS).

Références bibliographiques:

1 Electronic and structural properties of InAs/InP core/shell nanowires: A first principles study. Cláudia L. dos Santos and Paulo Piquini. J. Appl. Phys. 111, 054315 (2012); doi: 10.1063/1.3692440

2 Density-functional calculations for III-V nitrides using the local-density approximation and the generalized gradient approximation. C. Stampfl* and C. G. Van de Walle Xerox Palo Alto Research Center, 3333 Coyote Hill Road, Palo Alto, California 94304, PRB 59 (8) 1999

3 Thesis in second year, H. Mehdi, Institut Pascal