

Spécialité de Master « Optique, Matière, Plasmas »

Stage de recherche (4 mois minimum, à partir de début mars 2010)

Proposition de stage pour l'année 2009-2010 (**ne pas dépasser 1 page**)

Date de la proposition : 12/10/2009

Responsable du stage /internship supervisor			
Nom/name :	Goniakowski	Prénom/first name	Jacek
Tél :	01 44 27 46 17	Fax :	01 43 54 28 78
Courriel/mail :	Jacek.Goniakowski@insp.jussieu.fr		
Nom du Laboratoire / Laboratory name : Institut des Nanosciences de Paris, INSP			
Code d'identificati: UMR 7588:	Organisme : CNRS & UPMC		
Site Internet/web site :	http://www.insp.jussieu.fr		
Adresse/ address :	Campus de Boucicaut, 140 rue Lourmel, 75015 PARIS		
Lieu du stage/ Internship place:	INSP, Campus de Boucicaut, 140 rue Lourmel, 75015 PARIS		

Titre du stage /internship title : Des nano-oxydes aux formes originales
Résumé/summary
<p>Les technologies modernes permettent de fabriquer des objets artificiels aux propriétés originales, encore largement inexplorées, dont l'étude constitue la base des nanosciences. Un des défis majeurs est de maîtriser l'ajustement fin de ces propriétés (forme, structure, stœchiométrie, réactivité) par un contrôle de l'environnement (ex. contrainte imposée par un substrat, pression partielle de tel ou tel gaz, pH, etc). La compréhension des mécanismes sous-jacents implique une forte demande en simulations numériques réalistes. Si un nombre important de travaux a été consacré aux métaux et aux semi-conducteurs, il n'en va pas de même des oxydes isolants, qui, pourtant, constituent notre environnement naturel (minéraux, argiles, surfaces oxydées par le contact avec l'air...).</p> <p>En relation directe avec les expériences menées dans notre équipe, nous proposons une étude théorique de l'effet du support sur la forme et la structure atomique de petits agrégats d'oxyde, tels que MgO ou ZnO (rôle des contraintes élastiques liées au désaccord de paramètres de maille entre le substrat et l'agrégat, évolution en fonction de la taille de ce dernier, et structure des dislocations à l'interface qui en résultent), visant à comprendre les paramètres sur lesquels l'expérimentateur peut jouer pour fabriquer l'objet artificiel de son choix.</p> <p>Cette étude, quasiment impossible à mener par des techniques <i>ab initio</i>, en raison de la taille et de la complexité structurale des systèmes envisagés, est réalisable dans le cadre d'un modèle original développé dans notre équipe, fondé sur un traitement quantique et auto-cohérent de la structure électronique, mais très léger numériquement. Sur le plan technique, le travail peut comporter une phase d'optimisation du code et d'adaptation du modèle aux oxydes de métaux de transition.</p>
Toutes les rubriques ci-dessous doivent obligatoirement être remplies

Ce stage pourra-t-il se prolonger en thèse ? Possibility of a PhD ? : oui			
Si oui, financement de thèse envisagé/ financial support for the PhD : bourse du ministère			
Lasers et Matière	Oui	Physique des Plasmas	Oui
Optique de la science à la technologie	oui	Lumière, Matière : Mesures Extrêmes	Oui

Fiche à transmettre (fichier pdf **obligatoirement**) sur le site <http://stages.master-omp.fr>