

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

Date de la proposition : 01/10/2010

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	
Code d'identification : UMR 7588	Organisme : UPMC & CNRS
Site Internet / web site: http://www.insp.jussieu.fr/-Oxydes-en-basses-dimensions-.html	
Adresse / address: Jussieu, tour 22-23	
Lieu du stage / internship place: Jussieu, tour 22-12, étage 5	

Titre du stage / internship title:

Nano-oxydes : vers une simulation quantique de dizaines de milliers d'atomes.

Résumé / summary

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, stoechiométrie, 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...).

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.

Cette étude, quasiment impossible à mener par des techniques *ab initio*, 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.

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	x	Lumière, Matière : Mesures Extrêmes	x
Optique de la science à la technologie	x	Physique des plasmas	

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