

Spécialité de Master « Optique, Matière, Plasmas »

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

Proposition de stage

Date de la proposition : 01/10/2012

Responsable du stage / internship supervisor:

Nom / name: Jacek Goniakowski & Claudine Noguera

Tél : 01 44 27 46 17 (JG), 01 44 27 46 65 (CN)

Fax : 01 44 27 39 82

Courriel / mail: Jacek.Goniakowski @ insp.jussieu.fr & Claudine.Noguera@ insp.jussieu.fr

Nom du Laboratoire / laboratory name: Institut des Nanosciences de Paris, INSP

Code d'identification : UMR 7588

Organisme : CNRS/UPMC

Site Internet / web site: <http://www.insp.jussieu.fr>

Adresse / address: INSP, 4 place Jussieu, 75252 Paris cedex 05

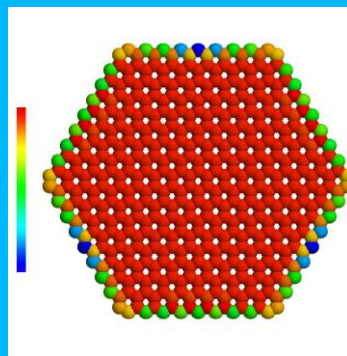
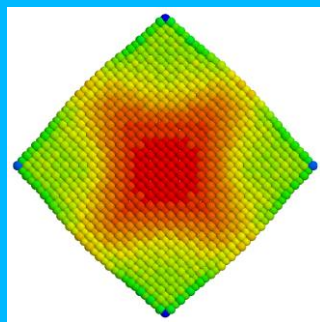
Lieu du stage / internship place: Jussieu

Titre du stage / internship title: **Simulation de nanoparticules d'oxydes**

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, stœchiométrie, réactivité) par un contrôle de l'environnement (ex. contrainte imposée par un substrat, pression partielle de tel ou tel gaz, pH, etc).

En relation directe avec les expériences menées dans notre équipe, nous proposons une exploration par simulation numérique de petits agrégats d'oxyde libres ou déposés sur un métal. Nous nous intéresserons surtout à l'effet des contraintes élastiques liées au désaccord de paramètres de maille entre le substrat et l'agrégat (figure de gauche représentant une carte des contraintes), aux effets électrostatiques et électroniques associés aux bords polaires de tels îlots (figure de droite représentant une carte des charges), aux propriétés de réactivité liées au confinement électronique et aux sites sous-coordonnés de coin et de bord.



Ce type d'étude fondamentale vise à identifier les paramètres sur lesquels l'expérimentateur peut jouer pour fabriquer des objets artificiels avec une taille, une forme et une structure électronique de son choix. L'étude va bénéficier d'un outil de simulation original, en cours de développement dans notre équipe.

MgO/metal interfaces at low coverage: An order N, semiempirical Hartree-Fock simulation, C. Noguera, J. Godet, J. Goniakowski, Phys. Rev. B **81**, 155409 (2010).

Connaissances et compétences requises : Bases de la description théorique de la structure électronique des matériaux, programmation en FORTRAN sous Linux

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 de l'ED

Lasers et matière	x	Lumière, Matière : Mesures Extrêmes	x
Optique de la science à la technologie	x	Plasmas : de l'espace au laboratoire	x