

PROPOSITION DE STAGE EN COURS D'ETUDES

Référence : **DMAS-2025-11**
(à rappeler dans toute correspondance)

Lieu : Châtillon

Département/Dir./Serv. : DMAS / LEM

Tél. : 01 46 73 44 64

Responsable(s) du stage : Lorenzo Sponza

Email : lorenzo.sponza@onera.fr

DESCRIPTION DU STAGE

Thématique(s) :

Type de stage : Fin d'études bac+5 Master 2 Bac+2 à bac+4 Autres

Intitulé : Modélisation des effets de dopage et défauts ponctuels dans la fonction diélectrique de $Al_xGa_{1-x}N$

Sujet : Quand un rayonnement de haute énergie (ion, électron, proton, photon) pénètre dans un matériau, il interagit avec les ions et les électrons qui le composent. Ainsi, multiples transferts d'énergie et de moment ont lieu, ce qui se traduit par des phénomènes de transport très complexes impliquant souvent des évènements en chaîne (cascades). Ces évènements peuvent engendrer des dégâts majeurs dans le matériau en question, dans d'éventuelles dispositifs intégrés, et même provoquer des détériorations irréversibles dans les tissus vivants. C'est pour ces raisons, que l'ingénierie de matériaux aptes à absorber, voire dévier, ces cascades est d'importance centrale dans l'élaboration de bouclier efficaces. A cette fin, un outil incontournable est la simulation détaillée des phénomènes de transport dont le point de départ est la fonction diélectrique complexe du matériau impliqué. En effet, cette quantité physique décrit les transferts d'énergie et de moment depuis une onde électromagnétique externe (généralisé par un photon ou une particule chargée qui passe à travers la matière) vers les électrons et les ions qui constituent le matériau.

Le sujet du stage porte justement sur l'étude de la fonction diélectrique complexe dans un matériau d'intérêt stratégique comme le $Al_xGa_{1-x}N$ avec $x=0, \dots, 1$. L'objectif du stage sera l'étude des changements de cette quantité en fonction de la variable de concentration x dans une fenêtre d'énergie allant jusqu'à l'ultraviolet lointain, mais aussi en présence de défauts ponctuels (lacunes, interstitiels, de substitution), voire de dopage électronique (dû, par exemple, à des ions Fe piégés en phase de fabrication). Les méthodes employées seront principalement des techniques à premiers principes (ab-initio) dans le cadre de théories fondées sur la fonctionnelle de la densité (DFT et TD-DFT) et sur les fonctions de Green (approximation GW). En fait, si la DFT assure une description fiable de la structure atomique et de la densité électronique de l'état fondamental, pour simuler la fonction de réponse et donc, in fine, la fonction diélectrique, il faut nécessairement utiliser des théories plus avancées qui donnent accès aux états excités (TD-DFT et GW).

La première partie du stage portera invariablement sur l'apprentissage de ces méthodes au niveau théorique et technique, c'est à dire des équations fondamentales, leur sens physique, et l'utilisation des codes de simulation déjà existants et en libre accès.

L'étude ci-proposée est propédeutique à un sujet de thèse de doctorat entre le CEA d'Arpajon et l'ONERA DPHY de Toulouse. Ceci portera sur le développement d'outils dédiés dans la suite Geant4 pour modéliser le transport électronique et ionique dans le $Al_xGa_{1-x}N$ où l'évaluation de la section efficace sera faite à partir de données fiables sur sa fonction diélectrique complexe.

Est-il possible d'envisager un travail en binôme ? Non

Méthodes à mettre en oeuvre :

Recherche théorique

Travail de synthèse

Recherche appliquée

Travail de documentation

Recherche expérimentale

Participation à une réalisation

Possibilité de prolongation en thèse : Oui

Durée du stage : 6 mois

Minimum :

Maximum :

Période souhaitée : de février à juillet 2025

PROFIL DU STAGIAIRE

Connaissances et niveau requis : Master 2 en physique ou école d'ingénieur avec des bases solides en science des matériaux

Ecoles ou établissements souhaités : école d'ingénieur ou université.