

## Poste de Thèse

### Modélisation DFT des surfaces et interfaces pour l'intégration monolithique de semiconducteurs III-V/Si

L'Institut FOTON – INSA Rennes propose une thèse de 36 mois financée par un projet national - ANR (NUAGES) dans le domaine de la Physique et portant plus précisément sur la description à l'échelle atomique des surfaces et interfaces dans les matériaux III-V sur Si. Cette thèse soutiendra de la microscopie électronique en transmission (TEM) à l'état de l'art avec des observations de croissance épitaxiale in situ à l'échelle atomique, effectuée dans le cadre du projet ANR "NUAGES".

**Date de début de la Thèse:** 1<sup>er</sup> Octobre 2022.

**Encadrement:**

-MCF (HDR), Laurent PEDESSEAU: <https://cv.archives-ouvertes.fr/laurent-pedesseau>

-PR, Charles CORNET: <https://cv.archives-ouvertes.fr/charles-cornet>

**Description du Project:**

L'intégration de semiconducteurs III-V sur des substrats Si nominaux (001) est un défi de longue date, qui a motivé de nombreuses recherches au cours des 40 dernières années. Cette intégration est une voie réaliste pour diminuer de manière significative le coût de fabrication de nombreux dispositifs. En effet, les procédés industriels standards Si offrent les avantages d'un substrat moins cher mais aussi plus grand. De plus, un large éventail de dispositifs photoniques passifs sont disponibles et optimisés sur substrat Si et leur technologie de fabrication est mature. Ainsi, cela donne une plus grande flexibilité de conception des circuits intégrés photoniques (PIC) par rapport aux technologies III-V. Et cela ouvre un champ d'application vers par exemple les lasers, la production d'énergie photovoltaïque ou même le stockage d'énergie à travers la production d'hydrogène solaire.

Le projet ANR NUAGES vise à imager en temps réel (in situ) et à clarifier la nucléation et plus généralement la croissance cristalline des semiconducteurs III-V sur substrats Si au niveau atomique. Dans le but d'interpréter les observations expérimentales, une aide théorique à l'échelle atomique est attendue en s'appuyant sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT). Ainsi, le travail des théoriciens dans l'ANR NUAGES est de déterminer les énergies de surface absolues des matériaux III-V, et les énergies d'interface III-V et III-V/Si pour différentes configurations. De plus, la description des propriétés des défauts cristallins (parois d'antiphase, dislocations) fera l'objet d'une attention spécifique. Sur la base des résultats obtenus par la DFT, l'étudiant aidera à interpréter les données expérimentales et proposera un scénario réaliste pour la nucléation.

Dans ce but, le doctorant réalisera majoritairement des simulations DFT, mais il s'appuiera également sur les technologies de pointe disponibles au laboratoire, pour la réalisation d'échantillons (épitaxie par jets moléculaires), ou disponibles en collaboration avec le consortium (TEM, STEM in situ & temps réel, XRD).

## Qualifications

Les candidats doivent être titulaires d'un master en science des matériaux ou en physique ou physique du solide. Les domaines de compétence sont orientés vers les semi-conducteurs, isolants ou plus généralement les matériaux. Le candidat doit avoir un réel intérêt à interagir avec des expérimentateurs. Le candidat doit avoir un certain attrait pour la théorie (DFT) étroitement liée au travail expérimental, en particulier TEM/STEM. Une bonne maîtrise de l'Anglais constitue un atout indispensable.

## Consortium

Le projet NUAGES est financé au niveau national par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR). Il est piloté par le **C2N** (Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies, CNRS/Université Paris-Saclay) en collaboration avec l'**IES** (Institut d'Electronique et des Systèmes, Université de Montpellier/CNRS) et **FOTON** (voir ci-dessous). Le doctorant interagira intensivement avec ces trois équipes reconnues dans le domaine.

### L'Institut FOTON (CNRS, UMR6082) et les centres de calculs nationaux HPC (TGCC, CINES)

L'**Institut FOTON** est une unité de recherche du Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) associé à l'Université de Rennes 1 et à l'Institut National des Sciences Appliquées (INSA) de Rennes. L'Institut FOTON est composé de trois équipes de recherche : l'équipe « Optoélectronique, Hétéroépitaxie et Matériaux » (OHM), l'équipe « Dynamique des lasers, photonique micro-ondes, Polarimétrie, térahertz, imagerie » située à Rennes, et l'équipe « Systèmes Photoniques » située à Lannion. Les deux villes sont situées à environ 170 km l'une de l'autre, dans la région Bretagne, dans l'ouest de la France. L'équipe de recherche OHM a une réputation établie dans le domaine des matériaux avancés pour les applications photovoltaïques, photoniques ou de conversion d'énergie.

**Le candidat retenu effectuera ses recherches à Rennes.**

Pour plus d'information sur l'Institut FOTON : <http://foton.cnrs.fr>.

## Informations complémentaires et Contact

Pour plus d'information sur le poste de thèse :

[laurent.pedesseau@insa-rennes.fr](mailto:laurent.pedesseau@insa-rennes.fr) ou [charles.cornet@insa-rennes.fr](mailto:charles.cornet@insa-rennes.fr)

## Candidature

Merci d'adresser votre candidature dans les meilleurs délais par e-mail à : [laurent.pedesseau@insa-rennes.fr](mailto:laurent.pedesseau@insa-rennes.fr). Votre candidature doit inclure:

- Lettre de motivation et CV détaillé
- Copie de votre diplôme de Master ou équivalent
- Vos relevés de notes
- Un test d'Anglais (TOEIC, TOEFL) (sauf pour le natif)
- Liste d'article scientifique si article il y a
- 2 lettres de recommandation