

PROPOSITION DE STAGE DE MASTER 2

Modélisation et prédiction des propriétés structurales de composés pour l'optique et l'électrique

Structure d'accueil : Institut des Matériaux Jean Rouxel, Université de Nantes, équipe : MIOPS

Sujet

La modélisation des défauts dans les cristaux et leurs impacts sont devenus des enjeux capitaux dans la compréhension et la rationalisation des propriétés électriques et optiques de matériaux à l'état solide.

L'équipe de recherche où aura lieu ce stage est un des fers de lance de la recherche française dans les domaines de l'optique, le photovoltaïque et les propriétés électriques, et possède de nombreuses collaborations avec des grandes entreprises. Le but du stage sera de modéliser les défauts à l'origine des propriétés opto-électroniques de composés obtenus expérimentalement, soit par des membres du groupe de recherche ou dans le cadre de collaborations nationale et internationale.

L'étudiant utilisera les outils de modélisation basée sur les méthodes de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et les logiciels scientifiques mis à la disposition au sein de notre laboratoire. Le travail proposé au cours de ce stage s'inscrit dans la poursuite d'un travail précédent qui a conduit à l'écriture de deux publications scientifiques. Ce stage de Master 2 pourra déboucher sur l'écriture d'un article dans une revue scientifique internationale et donnera au candidat de solides connaissances dans deux univers porteurs : la modélisation et la relation structure-propriété.

Le candidat recherché possède une bonne connaissance dans les matériaux et de solides compétences dans la modélisation. Une expérience dans un domaine similaire est un plus. Des connaissances de langage informatique, notamment python et fortran, sont également un plus.

Camille Latouche (Camille.Latouche@cnrsmn.fr)