



Étude de la modélisation DFTB pour l'adapter à des systèmes fortement chargés

Pierre-Matthieu Anglade^{*},

Julie Douady[†], Benoit Gervais[‡] et Emmanuelle Jacquet

Laboratoire CIMAP

Unité mixte UCBN – CEA – CNRS – ENSICAEN

6 boulevard du maréchal Juin, 14050 CAEN Cedex 4

25 novembre 2019

Ce stage est proposé dans le cadre de recherches portant sur la Sonde Atomique Tomographique (SAT). Il sera financé sur une durée de 4 mois. Les dates seront choisies en concertation entre l'étudiant et les encadrants.

La SAT est une technique d'analyse des matériaux permettant d'obtenir la composition chimique de solides, quantitativement et en trois dimensions. Schématiquement un échantillon du matériau à analyser est prélevé et taillé en forme d'aiguille. Il est placé dans une enceinte sous vide, porté à un potentiel électrique très différent de celui d'une grille qui servira de détecteur, puis soumis à un rayonnement laser périodique et puissant. L'effet combiné du champ électrique et du laser engendre l'émission de micro fragments. Ceux qui sont chargés sont attirés vers le détecteur. À partir des positions et temps d'arrivées, il est possible de reconstituer chaque trajectoire et de produire une analyse fine de la structure du matériau d'origine à l'aide de modèles théoriques.

Si ces modèles sont connus pour certains types de matériaux, pour d'autres — comme Si_n , $(\text{AlN})_n$, $(\text{GaN})_n \dots$ — ils restent encore à préciser. En effet, en fonction des propriétés chimiques des éléments constituant le matériau, il arrive que l'analyse des mesures SAT soit plus ou moins complexe.

^{*}P.-M. Anglade (02 31 45 26 65) - Email : pierre-matthieu.anglade@unicaen.fr

[†]J. Douady (02 31 45 25 77) - Email : julie.douady@ensicaen.fr

[‡]B. Gervais (02 31 45 47 93) - Email : gervais@ganil.fr

Afin d'affiner les connaissances pour ces matériaux l'équipe SIMUL du laboratoire CIMAP s'intéresse à la modélisation de cristaux nanométriques et à la manière dont les atomes en sont éjectés sous l'effet du champ électrique. Pour simuler ce genre d'objet, la méthode des liaisons fortes dépendantes de la charge (DFTB *density-functional tight-binding*¹) paraît une méthode prometteuse de par son efficacité calculatoire combinée à sa capacité potentielle à représenter des systèmes chargés. Elle a part exemple été mise à contribution pour l'étude d'électrodes².

Dans le cadre de l'étude de la SAT, les champs impliqués sont très importants et impliquent que les atomes soient amenés à perdre un ou plusieurs électrons. Malheureusement la DFTB telle que disponible présente des tares rédhibitoires pour de telles études. Notamment, le mauvais comportement des potentiels disponibles pour décrire l'effet d'un champ électrique (cf. stages L3 & M1 2019 de MM. Nieto et Jacquet), l'absence de polarisation des orbitales par un champ électrique extérieur, ou plus fondamentalement le fait que le modèle DFTB décrit la variation de la charge en perturbation, ce qui n'est pas compatible avec des variations de charge de plusieurs électrons.

L'objectif final de la recherche dans laquelle s'inscrit ce stage est de simuler un semi-conducteur telle que $(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N})_n$ en sonde atomique. Pour se faire il faudra créer un modèle DFTB pour ce matériau. Ce stage vise à étudier à la fois les méthodes utilisés pour créer des potentiels en DFTB, ainsi qu'à travailler sur l'adaptation du formalisme DFTB aux systèmes fortement chargés.

Travail : Le travail de ce stage sera donc double. Le premier objectif consistera en une étude bibliographique pour comprendre précisément comment sont développés les potentiels DFTB. Le second objectif consistera, sur la base des connaissances acquises, à évaluer la faisabilité du développement de potentiels DFTB pour des systèmes fortement chargés. Il s'agira initialement d'étudier purement le formalisme, et d'évaluer différentes solutions possibles pour des potentiels décrivant des cations plus ou moins chargés. Si l'avancement du stage le permet, et que des solutions théoriques sont trouvées aux faiblesses de la DFTB pour étudier les problèmes en SAT, il est envisagé de commencer à développer les outils qui permettront d'ajuster un potentiel DFTB pour des pointes d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

Perspectives : Deux demandes de financement de thèses (Labex & RIN) ont été déposées afin de pouvoir prolonger le travail de ce stage par une thèse de doctorat.

1. M. Elstner et coll., Self-consistent-charge density-functional tight-binding method for simulations of complex materials properties, Physical review B, volume 28, numéro 11, p. 7260

2. DFTB modelling of lithium intercalated graphite with machine-learned repulsive potential. arXiv : 1904.13352