

Matériaux chalcogénures hors-équilibre : de la physique fondamentale aux applications technologiques



TECHNOLOGY
RESEARCH
INSTITUTE



Les matériaux chalcogénures sont des alliages comportant au moins un élément S, Se ou Ge. Ce sont des éléments à la base des concepts les plus innovants en micro-électronique et micro-technologies par exemple pour la spintronique, la thermoélectricité, l'optique IR, et la réalisation de composants de mémoires non-volatiles et neuromorphiques [1,2] (PCM/Phase-Change Memory, OTS/Ovonic Threshold Switching devices, ONL/Optique Non-Linéaire, TE/ThermoElectrics, FESO/FerroElectric Spin-Orbit devices...). Une partie de leur fonctionnement repose sur une physique hors-équilibre induite par l'excitation électronique résultant de l'application d'un laser intense ou d'un fort champ électrique [2].

Le stage vise à simuler l'effet de l'excitation électronique induite par un champ électrique intense ou une impulsion laser optique [3] sur l'arrangement atomique de ces matériaux avec une résolution femtoseconde (fs). Les simulations ab-initio, suivant une méthode à l'état de l'art développée à l'université de Liège, seront couplées à un code de TDSE mis en place au CELIA. Les matériaux d'intérêts seront ceux produits en salle blanche au CEA-LETI et utilisés dans des applications industrielles. L'étude portera plus spécifiquement sur les verres à base de GeSe et la phase ferroélectrique du GeTe cristallin.

- Pour le GeSe, il s'agira d'étudier les phases hors équilibre et déduire des simulations les effets de cette excitation sur la structure électronique. Cette étude sera faite en couplant les résultats expérimentaux avec le code de simulations VASP ;

- Pour le GeTe ferroélectrique, il s'agira d'étudier l'efficacité de génération de seconde harmonique et son utilisation comme sonde structurale. Cette étude sera effectuée en utilisant une approche TDSE incluant la dynamique de spin.

L'objectif de ce travail est de prévoir la réponse électronique et optique des différents matériaux chalcogénures aux échelles de temps fs sous champ extrême ce qui permettra de percer les mécanismes physiques fondamentaux sous-jacents liant excitation électronique et structure atomique de ces alliages donnant ainsi dans le futur des règles de design afin d'optimiser les performances de ces matériaux.

Le stage se déroulera au laboratoire CELIA à Bordeaux, en étroite collaboration avec le groupe « matériaux chalcogénures » du CEA-LETI à Grenoble et des théoriciens de l'Université de Liège. Ce stage pourra se poursuivre par une thèse sur la même thématique dont le financement est déjà acquis et qui se déroulera au LETI à Grenoble toujours en étroite collaboration entre le CELIA/LETI/Univ Liège.

Compétences requises :

- **master 2 en physique/chimie idéalement spécialisé en solide / matériaux**
- **programmation idéalement python/fortran**

[1] A. Piarristeguy, P. Noé, et F. Hippert, « Verres de chalcogénures pour le stockage de l'information », Reflets phys., no 74, p. 58-63, déc. 2022, doi: 10.1051/refdp/202274058.

[2] Noé et al. « Toward ultimate nonvolatile resistive memories: The mechanism behind ovonic threshold switching revealed ». Science Advance 6 : eaay2830 (2020)

[3] Martinez et al. « Sub-Picosecond Non-Equilibrium States in the Amorphous Phase of GeTe Phase-Change Material Thin Films. » Adv. Mater. 33, 2102721 (2021)

contact : jerome.gaudin@u-bordeaux.fr , fabrice.catoire@u-bordeaux.fr

Web page: <https://harmodyn.celia.u-bordeaux.fr/>

Centre Lasers Intenses et Applications - UMR 5107 - UB/CNRS/CEA

43 rue Pierre Noailles – Talence - France