



Sujet de stage Master 2

Caractérisation par simulation *ab initio* des défauts dans le silicium dopé pour la fiabilité des composants microélectroniques

Sujet de stage :

La plupart des composants de la microélectronique sont à base de silicium dopé. Lors de ce dopage, des impuretés peuvent être introduites dans les couches de silicium. Ces impuretés vont affecter la fiabilité des composants par le changement des propriétés électroniques du silicium. Ces impuretés vont de plus interagir avec les défauts et les dopants présents dans le silicium pour créer de nouveaux complexes, qui peuvent impacter de façon plus ou moins importante le bon fonctionnement des composants.

Ce stage a pour objectif de caractériser par des calculs à l'échelle atomique dits « *ab initio* » les changements des propriétés du silicium en présence de ces impuretés et d'évaluer leurs interactions avec les défauts et les dopants présents dans le silicium. Les calculs *ab initio* se feront dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) afin de caractériser les structures, les propriétés électroniques et de diffusion de ces impuretés. Le stagiaire devra donc conduire ces simulations avec le code ABINIT et interpréter les résultats afin de mesurer l'impact en fonction de l'impureté étudiée. Ce stage permettra de créer des modèles pouvant être intégrés dans des codes à plus grande échelle et plus particulièrement dans les codes utilisés par les ingénieurs pour concevoir les composants.

FORMATION

Un master 2 portant sur la simulation des matériaux, la chimie théorique et la simulation numérique. Une formation sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) et une maîtrise de linux seraient des plus.

DATE DE DEBUT PREVU

1^{er} semestre 2020

Durée : entre 3 à 9 mois selon la disponibilité du stagiaire.

INFORMATIONS

Le stage se déroulera sur le centre du CEA-DIF, situé à Arpajon à 35 km au sud de Paris et desservi, entre autres, par un système de bus depuis une grande partie région parisienne. Le stagiaire profitera des supercalculateurs du CEA pour mener à bien son étude ainsi que des nombreuses interactions et collaborations en interne CEA ou avec d'autres organismes de recherche en France ou à l'étranger. Le stage est rémunéré et pourrait être suivi d'une thèse.

CONTACT

Dr. Nicolas RICHARD

nicolas.richard@cea.fr