

Objet : Offre Thèse CIFRE « Criblage à haut débit pour le développement de matériaux thermistors performants. »

La société LYNRED (<https://lynred.com/fr>) développe et commercialise des détecteurs non refroidis pour l'imagerie thermique. Ces détecteurs sont des matrices de microbolomètres; structures MEMS comprenant un matériau sensible dont l'échauffement, généré par l'absorption du rayonnement infrarouge incident, fournit un signal électrique [1]. Elle est l'un des leaders mondiaux de ce secteur en forte croissance et peut s'appuyer sur l'étroite collaboration qu'elle entretient avec le CEA-Leti (<https://www.leti-cea.fr/cea-tech/leti>) pour les développements technologiques amonts.

Un projet, toujours en cours, entre le CEA-Leti et LYNRED a permis d'élaborer un matériau sensible (ou matériau thermomètre), élément clé de la performance des microbolomètres, aux caractéristiques améliorées. Ce nouveau matériau est un oxyde de vanadium amorphe (VOx) dont le dopage permet de stabiliser sa structure [2], [3]. Ce matériau présente à la fois un très faible niveau de bruit en $1/f$ et un TCR (« Temperature Coefficient of Resistance ») élevé, caractéristiques nécessaires pour les applications bolométriques.

Même si ce matériau répond aux exigences de performances des produits actuels, un saut technologique sera nécessaire pour atteindre les pas pixels ultimes dans la bande LWIR (« Long Wavelength InFRared ») – typiquement 5 μm .

La thèse a pour but de déterminer, par des outils de simulation numérique, une composition optimale du matériau permettant d'obtenir un TCR maximal tout en répondant aux contraintes industrielles (la gamme utile de résistivité en particulier). Les travaux d'une thèse précédente ont permis de montrer l'intérêt d'utiliser les outils de simulations atomistiques pour calculer des barrières d'énergie de sauts (qui conditionnent le TCR) dans les cristaux d'oxydes de Vanadium [4] et dans les amorphes (travaux internes, manuscrit en cours de rédaction). Des outils permettant de calculer la densité de porteurs ainsi que la mobilité en température ont également été développés. Si les travaux de cette thèse se sont montrés très encourageants, le temps de calcul demeure un problème majeur pour l'utilisation de ce type de simulations dans une optique d'optimisation d'un matériau thermorésistif via une approche de criblage à haut débit.

Ainsi, l'objectif de cette thèse doit nous permettre de conserver la précision des outils de simulations *ab initio* (DFT) tout en accélérant grandement les temps de calculs. Cela pourra passer, par exemple, par des approches d'apprentissage automatique (*machine learning*).

La thèse bénéficiera de la dynamique existante au CEA-Leti autour du développement des VOx, qui fait l'objet de plusieurs projets en cours de réalisation en collaboration avec LYNRED. Cette thèse s'inscrit de ce fait pleinement dans la stratégie des équipes de R&D du CEA-Leti et de LYNRED et d'une collaboration historique centrée sur le développement de matériaux thermomètres toujours plus innovants [2], [5]. Elle s'appuiera, en outre, sur le Laboratoire de Simulation et Modélisation (LSM) du CEA-Leti qui dispose d'une expertise en matière de calculs de structure électronique *ab initio* pour des oxydes de métaux de transition [6], [7], l'utilisation des techniques d'apprentissage automatique en science des matériaux [8], [9] ainsi que sur la remontée d'échelle vers une modélisation physique.

Le candidat disposera d'un accès aux moyens de calcul haute performance du CEA-Grenoble et sera également amené à effectuer des mesures expérimentales (mesures de résistivité en température, C(V), ...) sur des échantillons dédiés en utilisant les moyens de caractérisation du CEA Grenoble ou de LYNRED. Des réunions d'échanges seront organisées entre le CEA-Leti et LYNRED à intervalles réguliers.

- [1] J.-L. Tissot, *Tech. Ing. Compos. Optoélectroniques*, vol. base documentaire : TIB451DUO., n° ref. article : e4061, 2010.
- [2] A. Cardoso, *Thèse de doctorat Matériaux, mécanique, génie civil, électrochimie, Université Grenoble Alpes*, 2021.
- [3] M. Guillaumont et al., *Proc. SPIE*, mai 2022, p. 1210716. doi: 10.1117/12.2618494.
- [4] R. Defrance, B. Sklénard, M. Guillaumont, J. Li, et M. Freyss, *Solid-State Electron.*, vol. 198, p. 108455, déc. 2022.
- [5] M. Guillaumont, *Thèse de doctorat Matériaux, mécanique, génie civil, électrochimie, Université Grenoble Alpes*, 2016.
- [6] B. Sklénard, A. Dragoni, F. Triozon, et V. Olevano, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 113, n° 17, p. 172903, oct. 2018.
- [7] B. Sklénard, L. Cvitkovich, D. Waldhoer, et J. Li, *J. of Physics D : Applied Physics*, Mars 2023.
- [8] S.-H. Lee, V. Olevano et B. Sklénard, *Solid-State Electron.*, vol. 199, p. 108508, janv. 2023.
- [9] S.-H. Lee, J. Li, V. Olevano et B. Sklénard, « *Equivariant graph neural network interatomic potential for Green-Kubo thermal conductivity in phase change materials* », Submitted, 2023.

Profil souhaité :

- Diplômé MASTER 2 ou ingénieur spécialisé en physique et/ou matériaux
- Très bonne connaissance des propriétés physiques des matériaux
- Très bonne connaissance des principales techniques de caractérisation électriques des matériaux
- Des notions en matière de calculs de structure électronique *ab initio*, ainsi que des outils numériques associés, seraient appréciées
- Force de proposition, curieux et motivé
- Souhaite travailler dans un environnement multidisciplinaire en interface entre le milieu industriel (LYNRED) et des laboratoires de recherche (CEA-Leti).
- L'autonomie du candidat sera essentielle pour profiter au mieux de la variété des compétences et des moyens de caractérisations disponibles au CEA-Leti.

Type d'emploi : CDD (Ingénieur doctorant)

Encadrants CEA: Benoît Sklénard (benoit.sklenard@cea.fr) et Jing Li (Jing.LI@cea.fr)

Encadrant LYNRED: Marc Guillaumont (marc.guillaumont@lynred.com)

Offre détaillée sur Indeed : [Thèse CIFRE : optimisation des matériaux thermomètres par simulation - France - Indeed.com](#)