



## Etude du germanium contraint en compression par un substrat de silicium

**Spécialité** Spectroscopie

**Niveau d'étude** Bac+4/5

**Formation** Master 1

**Unité d'accueil** [DEDIP/DEPHYS](#)

**Candidature avant le** 02/09/2020

**Durée** 3 mois

**Poursuite possible en thèse** oui

**Contact** [FOURCHES Nicolas](#)  
+33 1 69 08 61 64  
[nicolas.fourches@cea.fr](mailto:nicolas.fourches@cea.fr)

### Résumé

Calcul des modes vibratoires et comparaison avec les résultats de diffusion Raman déjà existant. Les logiciels de simulation sont SIESTA et éventuellement d'autres codes similaires.

### Sujet détaillé

Etude du germanium contraint en compression par un substrat de silicium. Calcul des modes vibratoires et comparaison avec les résultats de diffusion Raman déjà existant. Les logiciels de simulation sont SIESTA et éventuellement d'autres codes similaires. Le (La) candidate devra analyser le problème d'un point de vue physique et ensuite décrire les modèles utilisés dans le code de simulation pour vérifier leur adéquation. On pourra ajouter si possible une simulation de la structure électronique. Le candidat devra faire le point sur les possibilités et restrictions qu'offrent ces codes de simulation. Ces simulations permettront de prédire les propriétés de la grille enterrée dans le futur dispositifs DotPIX.

### Mots clés

mecanique quantique

### Compétences

Ab- initio simulations

### Logiciels

Siesta

---

## Germanium compressively strained in a silicon substrate: a simulation study

### Summary

Calculation of the vibrational modes and comparison with of experimental Raman Scattering results. The simulation software is SIESTA and other similar codes if proved necessary.

### Full description

Germanium compressively strained in a silicon substrate: a simulation study

Calculation of the vibrational modes and comparison with of experimental Raman Scattering results. The simulation software is SIESTA and other similar codes if proved necessary. The candidate have to analyse the physics of the structure and check the adequacy of the models used in the simulation code. It should also be interesting to determine the electronic structure of the buried layer by simulation. The aim of this work is to predict the properties of the buried gate in the future DoTPiX devices.

### Keywords

quantum mechanics

### Skills

ab initio simulations

### Softwares

Siesta