

## INTERNSHIP PROPOSAL

Laboratory name: CEMES  
CNRS identification code: UPR8011  
Internship director's surname: Rémi Arras  
e-mail: remi.arras@cemes.fr Phone number: 0562257856  
Web page: <https://www.cemes.fr/en/mem-eng/>  
Internship location: Toulouse, France

Thesis possibility after internship: YES  
Funding: YES If YES, which type of funding: ANR

### **Calculs *ab initio* des propriétés électroniques d'oxydes NdNiO<sub>3-x</sub> pour applications neuromorphiques**

**Contexte** : L'étude d'oxydes de structure pérovskite déficitaires en oxygène constitue un domaine de recherche en pleine expansion, dont le but est de découvrir de nouveaux matériaux fonctionnels à fort potentiel pour de nombreuses applications. C'est en particulier le cas des nickelates de terre rare RNiO<sub>3-x</sub> qui, depuis plusieurs années, ont motivé un important effort de recherche fondamentale, tant expérimentale que théorique, afin de mieux comprendre leurs diagramme de phases très riches, incluant des phases cristallographiques métalliques, isolantes et paramagnétiques, ou antiferro- magnétiques. Ces composés ont acquis récemment une notoriété encore plus importante suite à la découverte d'un état supraconducteur dans des structures (Nd,Sr)NiO<sub>2</sub> à plans carrés infinis. Du fait des corrélations électroniques importantes dans ces composés et de leur structure cristalline facilement modulable par mise en ordre des lacunes d'oxygène, ces matériaux sont également considérés comme des candidats prometteurs pour la réalisation de dispositifs memristifs permettant des applications neuromorphiques.

**Objectifs** : Au cours de ce stage, nous proposons de calculer numériquement les propriétés physiques (structure atomique et électronique, moments magnétiques de spin et orbitaux) de l'oxyde NdNiO<sub>3</sub>. Nous étudierons ensuite la stabilité thermodynamique de phases NdNiO<sub>3-x</sub> (0 < x < 1), en fonction de la distribution des lacunes d'oxygène et des déformations structurales induites par la présence de ces défauts. L'objectif principal de ce stage sera de comprendre le lien étroit qui relie les distorsions atomiques générées dans les possibles phases de l'oxyde NdNiO<sub>3-x</sub> et la modification de leurs propriétés électroniques par rapport à celles du cristal parfait NdNiO<sub>3</sub>.

Durant ce stage, des calculs *ab initio* de la structure électronique des nickelates seront réalisés en utilisant le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Le stage pourra éventuellement comprendre une partie de développement des codes nécessaires au post-traitement des résultats DFT.

**Pré requis** : Bonnes connaissances en physique de la matière condensée et mécanique quantique / fort intérêt pour la physique numérique / maîtrise correcte d'au moins un langage de programmation également souhaitée.

**Détails pratiques** : Le stage de niveau M2 se déroulera au printemps 2026 au CEMES à Toulouse, dans le cadre du projet « Génération de phases métastables dans les nickelates pour le développement de fonctionnalités neuromorphiques » (TaMe) financé par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR). Le projet TaMe réunit des expérimentateurs et théoriciens de 3 laboratoires français, avec lesquels des échanges réguliers seront entretenus. Sous réserve d'un accord commun, il sera possible de poursuivre en thèse dans le même projet à l'issue du stage (financement acquis); la thèse se déroulera au CEMES à Toulouse.

Please, indicate which speciality(ies) seem(s) to be more adapted to the subject:

Condensed Matter Physics: YES      Soft Matter and Biological Physics: NO  
Quantum Physics: YES                      Theoretical Physics: NO