

Calculs *ab initio* de la stabilité et des propriétés électroniques d'oxydes NdNiO_{3-x} pour applications neuromorphiques

Contacts : Rémi Arras (CEMES, Toulouse, remi.arras@cemes.fr),
Lionel Calmels (CEMES, Toulouse, lionel.calmels@cemes.fr)

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 [1]. C'est en particulier le cas des nickelates de terre rare RNiO_{3-x} 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 $(\text{Nd,Sr})\text{NiO}_2$ à plans carrés infinis [2]. 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 [3, 4].

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_3 . Nous étudierons ensuite la stabilité thermodynamique de phases NdNiO_{3-x} ($0 < x < 1$), 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_{3-x} et la modification de leurs propriétés électroniques [5] par rapport à celles du cristal parfait NdNiO_3 .

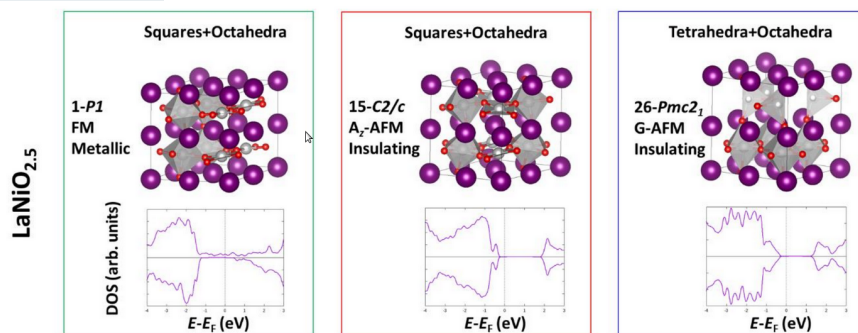


Figure: Exemple de phases cristallines envisagées pour l'oxyde $\text{LaNiO}_{2.5}$. Chacune de ces structures présente un ordre magnétique et une structure électronique différents. Ces phases forment des états métastables pouvant permettre de coder de l'information dans des dispositifs électroniques à basse consommation énergétique.

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.

Prérequis : Le candidat devra posséder de bonnes connaissances en physique de la matière condensée et mécanique quantique, ainsi qu'un fort intérêt pour la physique numérique. Il devra également être capable de communiquer aisément ses résultats, à l'oral comme à l'écrit. Une maîtrise correcte d'au moins un langage de programmation est 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.

Références :

- [1] Z. Meng, *et al.*, *Topotactic transition: A promising opportunity for creating oxides*, Adv. Funct. Mater. **2023**, 2305225 (2023).
- [2] D. Li, *et al.*, *Superconductivity in an infinite-layer nickelate*, Nature **572**, 624 (2019).
- [3] V. Humbert, *et al.*, *An oxygen vacancy memristor ruled by electron correlations*, Adv. Sci. **9**, 2201753 (2022).
- [4] Z. Zhang, *et al.*, *Quantum nickelate platform for future multidisciplinary research*, J. Appl. Phys. **131**, 120901 (2022).
- [5] R. Arras, *et al.*, *Effect of an electric field on ferroelectric and piezoelectric properties of brownmillerite $\text{Ca}_2\text{Al}_2\text{O}_5$* , Phys. Rev. B **107**, 144107 (2023).

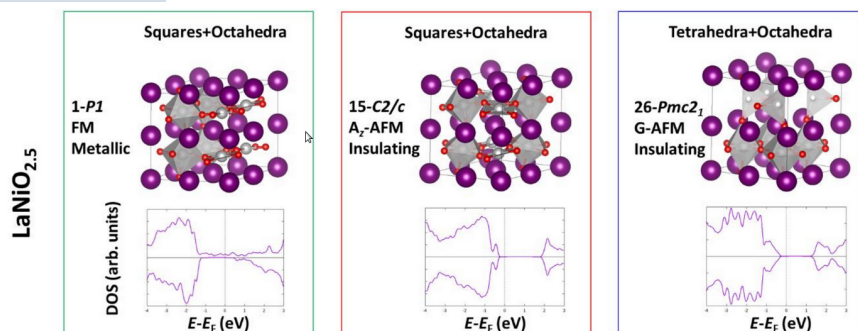
(English version below)

First-principles calculation of the thermodynamical stability and electronic properties of NdNiO_{3-x} oxides for neuromorphic applications

Contacts : Rémi Arras (CEMES, Toulouse, remi.arras@cemes.fr),
Lionel Calmels (CEMES, Toulouse, lionel.calmels@cemes.fr)

Context: The study of oxygen-deficient perovskites is a fast-growing field of research which may allow the discovery of functional materials potentially interesting for a wide range of applications [1]. It is particularly the case of RNiO_{3-x} perovskites, which have stimulated several experimental and theoretical research efforts because of their rich phase diagrams including different crystallographic phases associated with metallic / insulating and paramagnetic / antiferromagnetic states. Nickelates have recently become even more famous because of the major breakthrough in condensed matter with the finding of a superconducting state in infinite square-planar lattices [2]. Owing to their strong electronic correlations, their tunable atomic structures and their rich properties, Ni-based perovskites are moreover considered as promising candidates for memristive and neuromorphic applications [3, 4].

Goals: During this internship, we propose to calculate numerically the physical properties (atomic and electronic structure, spin and orbital magnetic moments) of NdNiO_3 bulk oxide. We will then study the thermodynamical stability of phases NdNiO_{3-x} ($0 < x < 1$) as a function of the distribution of oxygen vacancies and of structural strain induced by the presence of these defects. The main goal of this internship will be to understand the intricate link between the atomic distortions in the new structural phases and the induced modifications of their physical properties [5] in regard to those calculated for the perfect NdNiO_3 crystal.



Example of structural phases generated for the $\text{LaNiO}_{2.5}$ oxide. Each of these structures presents a specific magnetic ordering and electronic structure, which could be used as metastable states to encode information in electronic devices with low energy consumption.

Ab initio numerical calculations of the electronic structure of nickelates will be performed using the density functional theory (DFT). During the internship, a few code developments may be needed for the post-processing of the DFT data.

Prerequisite: The candidate will have a good knowledge of condensed-matter and quantum physics, a strong interest in numerical physics, and good communication skills (oral and writing). Correct mastery of at least one programming language is also desired.

Practical details: This internship is dedicated to Master 2 students. It will be performed during spring 2026 (for a duration of approximately 5-6 months), at the CEMES, in Toulouse, within the framework of the ANR project "*Tailoring metastable phases in nickelates: toward neuromorphic functionalities*". The project TaMe gathers experimentalists and theoreticians from 3 national laboratories, with whom regular scientific exchanges will be maintained. Upon mutual agreement, it will be possible to continue this subject with a PhD, within the same project (funding already acquired); the thesis will also take place at the CEMES in Toulouse.

Bibliography:

- [1] Z. Meng, *et al.*, *Topotactic transition: A promising opportunity for creating oxides*, Adv. Funct. Mater. **2023**, 2305225 (2023).
- [2] D. Li, *et al.*, *Superconductivity in an infinite-layer nickelate*, Nature **572**, 624 (2019).
- [3] V. Humbert, *et al.*, *An oxygen vacancy memristor ruled by electron correlations*, Adv. Sci. **9**, 2201753 (2022).
- [4] Z. Zhang, *et al.*, *Quantum nickelate platform for future multidisciplinary research*, J. Appl. Phys. **131**, 120901 (2022).
- [5] R. Arras, *et al.*, *Effect of an electric field on ferroelectric and piezoelectric properties of brownmillerite $\text{Ca}_2\text{Al}_2\text{O}_5$* , Phys. Rev. B **107**, 144107 (2023).