

Spécialité : PHYSIQUE / Physique des matériaux

[Laboratoire : /SPEC/LNO](#)

Films minces multifonctionnels pour la transition énergétique et l'opto-spintronique à base de BaTiO₃ dopé azote.

Responsable de stage : BARBIER Antoine

antoine.barbier@cea.fr

Tel : +33 1 69 08 39 23

Stage pouvant se prolonger en thèse : Oui

Durée du stage : 5 mois

Résumé:

L'objectif de ce stage est d'élaborer des couches minces épitaxiées d'oxynitrides BaTi(OxN_{1-x})₃ par épitaxie par jets moléculaires assistée de plasmas azote et oxygène atomiques : un matériau ferroélectrique sensible au spectre solaire. On procédera par dopage de films de BaTiO₃ dont les conditions de croissance sont déjà parfaitement maîtrisées au laboratoire CEA/SPEC. On étudiera le potentiel d'application de ces films pour la photoélectrolyse de l'eau et/ou l'opto-spintronique au laboratoire et potentiellement au C2N et au synchrotron-SOLEIL.

Sujet :

La transition énergétique requiert le développement de nouveaux matériaux dédiés, en particulier, à la production d'énergie propre et/ou permettant des économies d'énergie dans les systèmes électroniques. Dans ce cadre, les oxynitrides constituent une classe de matériaux pertinents. Parmi ceux-ci, les composés ferroélectriques sont particulièrement bien adaptés pour réaliser des capteurs opto-spintronique et pour la production d'hydrogène par photoélectrolyse de l'eau. L'insertion d'azote, moins électronégatif que l'oxygène, dans le réseau d'un oxyde engendre une augmentation du caractère covalent des liaisons chimiques. Cela se traduit par une diminution de la valeur du gap optique E_g et donc par une modification des propriétés d'absorption du composé. On s'attend également à des nouvelles propriétés de transport induite par le dopage par l'azote. La réalisation de films minces monocristallins d'oxynitrides est cependant délicate et a été peu étudiée à ce jour.

Nous allons explorer la possibilité de moduler les propriétés de couches minces d'oxydes de titanate de Baryum, BaTiO₃, ferroélectriques dont nous maîtrisons déjà la croissance par l'adjonction d'un plasma azote durant la croissance. Idéalement, on s'attachera à quantifier le ratio entre la perte de ferroélectricité et le gain de l'activité en tant que photoanode dans la photoélectrolyse de l'eau. Nous étudierons également l'influence de la lumière sur les propriétés. Enfin, si le temps le permet nous déposerons une couche magnétique sur le film d'oxynitride afin d'étudier l'influence du dopage azote sur les propriétés magnétiques. On pourra également envisager des mesures en diffraction des rayons X pour caractériser les matériaux élaborés sur la ligne DiffAbs au synchrotron SOLEIL et des mesures ferroélectriques après lithographie au C2N.

Contacts : BARBIER Antoine, +33 1 69 08 39 23, antoine.barbier@cea.fr

Autres chercheurs impliqués : H. Magnan, S. Matzen (C2N), J.-B. Moussy et C. Mocuta (Synchrotron-SOLEIL) - Le stage repose sur une collaboration CEA, C2N, SOLEIL.

N doped BaTiO₃ multifunctional thin films for opto-electronics and energy transition

Abstract:

The objective of the internship is to grow thin BaTi(O_xN_{1-x})₃ oxynitride films by oxygen and nitrogen plasma assisted molecular beam epitaxy: a visible light sensitive ferroelectric material. We will proceed by nitrogen doping of BaTiO₃ for which the growth conditions are perfectly mastered in the CEA/SPEC laboratory. Potential application to water-splitting and/or opto-spintronics will be studied in the laboratory and potentially at C2N and at synchrotron-SOLEIL.

Subject :

Novel materials are required within the energy transition framework, in particular to produce clean energy and/or reduce electronic device consumption. Within this context oxynitrides are a relevant class of materials. The ferroelectric ones are very well suited to realize opto-spintronic sensors or electrode materials for hydrogen production through solar water splitting. The insertion of nitrogen, less electronegative than oxygen, into the lattice of an oxide causes an increase in the covalent nature of the chemical bonds. This leads to a decrease of the optical gap, E_g , value and thus in a modification of the absorption properties of the compound as well as doping by charge carriers making it possible to envisage new transport properties. The production of single crystalline thin oxynitride films is however challenging and has been little studied to date.

We will explore the possibility of modulating the properties of thin films of barium titanate, BaTiO₃, a ferroelectric oxide. Its growth conditions are already well mastered and we will proceed by the addition of nitrogen plasma during growth. Ideally, the ratio between the loss of ferroelectricity and the gain of activity as a photoanode in the photoelectrolysis of water will be quantified. The influence of visible light on the structures will be studied. If possible we will deposit a magnetic layer and study the influence of the N doping on the magnetic properties. X-ray diffraction measurements may be used to characterize the material developed on the DiffAbs beamline at the SOLEIL synchrotron as well as ferroelectric measurements on patterned samples at C2N.

Contacts: BARBIER Antoine, +33 1 69 08 39 23, antoine.barbier@cea.fr

Additional implicated researchers: H. Magnan, S. Matzen (C2N), J.-B. Moussy and C. Mocuta (Synchrotron-SOLEIL) - The internship relies on a CEA, C2N, SOLEIL collaboration.
