

Spécialité : PHYSIQUE / Physique des matériaux

[Laboratoire : /SPEC/LNO](#)

Elaboration de films minces d'oxynitrides $\text{BaTi}(\text{OxN}_{1-x})_3$ par épitaxie par jets moléculaire assistée de plasma atomique

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 $\text{BaTi}(\text{OxN}_{1-x})_3$ par épitaxie par jets moléculaires assistée de plasmas azote et oxygène atomiques. On procédera par dopage de films de BaTiO_3 dont les conditions de croissance sont déjà parfaitement maîtrisées au laboratoire CEA/SPEC. L'étude sera complétée par des mesures de propriétés macroscopiques comme la ferroélectricité et/ou la photoélectrolyse de l'eau. Des mesures complémentaires pourront être envisagées au synchrotron-SOLEIL.

Sujet :

Les oxynitrides constituent une classe de composés présentant un large spectre de propriétés exploitables pour une grande variété d'applications allant des absorbeurs UV destinés à pérenniser des composés organiques fragiles, aux semi-conducteurs adaptés aux dispositifs photovoltaïques, photocatalytiques et de photoélectrolyse en passant par des composés magnétiques. 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 ainsi que par le dopage par des porteurs de charges permettant d'envisager de nouvelles propriétés de transport. 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, BaTiO_3 , ferroélectriques dont nous maîtrisons déjà la croissance par l'adjonction d'un plasma azote durant la croissance. Les taux de dopage resteront faibles. 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. On pourra envisager des mesures en diffraction des rayons X pour caractériser le matériau élaboré sur la ligne DiffAbs au synchrotron SOLEIL.

Contacts : BARBIER Antoine, +33 1 69 08 39 23, antoine.barbier@cea.fr ; Autres chercheurs impliqués : H. Magnan, J.-B. Moussy et C. Mocuta (Synchrotron-SOLEIL)

Elaboration of oxynitride $\text{BaTi}(\text{OxN}_{1-x})_3$ thin films by atomic plasma assisted molecular beam

Abstract:

The objective of the internship is to grow thin $\text{BaTi}(\text{O}_x\text{N}_{1-x})_3$ oxynitride thin films by oxygen and nitrogen plasma assisted molecular beam epitaxy. We will proceed by nitrogen doping of BaTiO_3 for which the growth conditions are perfectly mastered in the CEA/SPEC laboratory. The study will be completed by macroscopic characterizations of the ferroelectric and/or photoelectrolytic behaviors. Complementary measurements may be realized at synchrotron-SOLEIL.

Subject :

Oxynitrides are a class of compounds with a broad spectrum of exploitable properties for a wide variety of applications ranging from UV absorbers (to sustain fragile organic compounds), to semiconductors (suitable for photovoltaic), photocatalytic and photoelectrolysis devices to magnetic compounds. 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, BaTiO_3 , a ferroelectric oxide. Its growth conditions are already well mastered and we will proceed by the addition of nitrogen plasma during growth. Doping rates will remain low. Ideally, the ratio between the loss of ferroelectricity and the gain of activity as a photoanode in the photoelectrolysis of water will be quantified. X-ray diffraction measurements may be used to characterize the material developed on the DiffAbs line at the SOLEIL synchrotron.

Contacts: BARBIER Antoine, +33 1 69 08 39 23, antoine.barbier@cea.fr ; Other researchers: H. Magnan, J.-B. Moussy et C. Mocuta (Synchrotron-SOLEIL)
