



Les phases structurales des couches minces ferroélectriques sous contrainte étudiées par la diffraction des photoélectrons

Spécialité Physique de la matière condensée

Niveau d'étude Bac+5

Formation Master 2

Unité d'accueil [SPEC/LENSIS](#)

Candidature avant le 27/04/2018

Durée 6 mois

Poursuite possible en thèse oui

Contact [BARRETT Nick](#)
+33 1 69 08 32 72
nick.barrett@cea.fr

Résumé

Les changements structurels dans les films minces peuvent modifier leur état ferroélectrique et donc la performance de ces matériaux dans des dispositifs nanoélectroniques, capteurs chimiques ou encore comme cellules photovoltaïques. L'objectif du stage est de caractériser les déformations de surface dans la structure atomique de films épitaxiés ferroélectrique par XPD (Photodiffraction de rayons X).

Sujet détaillé

Une des propriétés fondamentales d'un matériau ferroélectrique (FE) est sa polarisation spontanée en-dessous de la température de Curie, qui peut être inversée sous l'application d'un champ électrique externe. Les changements structuraux de surface intervenant dans les couches minces peuvent modifier l'état FE [1] et en conséquence la performance de ces matériaux dans les dispositifs nanoélectroniques, les capteurs chimiques ou les cellules photovoltaïques. En particulier, la polarisation peut être basculée par un recuit sous pression partielle d'oxygène [2] et la contrainte en épitaxie peut générer des phases FE complètement nouvelles [3].

La diffraction des photoélectrons stimulés par les rayons X (XPD) combine la sensibilité chimique de la photoémission des niveaux de cœur avec celle de l'ordre local autour de l'atome émetteur de photoélectrons. L'intensité de la photoémission est mesurée en fonction de l'angle d'émission au-dessus de l'échantillon [4], donnant des informations sur les distances interatomiques, les angles des liaisons et les états chimiques. Il est alors idéalement adapté aux mesures des distorsions atomiques d'extrême surface des couches minces FE en épitaxie [5]. IRAMIS vient d'acquérir un nouveau dispositif d'XPD à haute résolution angulaire et un système d'acquisition automatisé.

Les couches minces seront préparées par l'Institut National de Physique des Matériaux (Magurele, Roumanie). Les analyses XPD seront faites en fonction des conditions redox des recuits in-situ. L'analyse des données sera effectuée avec les procédures utilisant le logiciel Igo Pro.

[1] A. Pancotti et al., Phys. Rev. B 87, 184116 (2013).

[2] M. Highland et al., Phys. Rev. Lett. 107, 187602 (2011).

[3] R.J. Zeches et al., Science 326, 977 (2009).

[4] J. Osterwalder et al., Phys. Rev. B 44, 13764 (1991).

[5] L. Despont et al., Phys. Rev. B 73, 094110 (2006).

Mots clés

Diffraction des photoélectrons, ferroélectrique, couches minces, contrainte

Compétences

Diffraction des photoélectrons, diffraction des électrons à basse énergie, spectroscopie des photoélectrons

Logiciels

Igor Pro

X-ray photoelectron diffraction study of structural phases in epitaxially strained ferroelectric thin films

Summary

Structural changes in thin films can modify the ferroelectric (FE) state and thus the performance of these materials in nanoelectronic devices, chemical sensors or photovoltaic cells. X-ray Photoelectron Diffraction measure the surface distortions in the atomic structure of epitaxial FE films

Full description

A fundamental property of ferroelectric (FE) materials is their electrically switchable spontaneous polarization below the Curie temperature, which has driven promising applications of such materials as nonvolatile memory storage devices and sensors. Structural changes in thin films can modify the ferroelectric state [1] and thus the performance of these materials in nanoelectronic devices, chemical sensors or photovoltaic cells. The polarization state may be chemically switched by annealing under oxygen [2] and epitaxial strain can engineer completely new FE phases [3].

X-ray Photoelectron Diffraction (XPD) combines the chemical sensitivity of core level photoemission with local order sensitivity around the emitting atom. The photoemission intensity is measured as a function of angle above the sample [4], giving information on interatomic distances, bond angles and chemical states. It is therefore ideally suited to measure the surface distortions in the atomic structure of epitaxial FE films [5]. IRAMIS has recently installed a new, high angular resolution XPD experiment with fully automatic data acquisition system.

Perovskite oxide ferroelectric films have been grown by the National Institute of Materials Physics (Magurele, Romania). XPD data will be acquired for films annealed in both redox conditions. Optimized data analysis will be done using Igor Pro software. The subject requires a good grounding in solid state physics and a desire for experimental teamwork.

(a) Schematic XPD experiment (b) Tetragonal BaTiO₃ with Ti (grey) off-centering (c) Ti 2p XPD data from single crystal BaTiO₃(001) allowing measurement of the Ti displacement in the surface unit cell.

[1] A. Pancotti et al., Phys. Rev. B 87, 184116 (2013).

[2] M. Highland et al., Phys. Rev. Lett. 107, 187602 (2011).

[3] R.J. Zeches et al., Science 326, 977 (2009).

[4] J. Osterwalder et al., Phys. Rev. B 44, 13764 (1991).

[5] L. Despont et al., Phys. Rev. B 73, 094110 (2006).

Keywords

Photoelectron diffraction, ferroelectric, thin films, strain

Skills

X-ray photoelectron diffraction and spectroscopy. Low energy electron diffraction

Softwares

Igor Pro