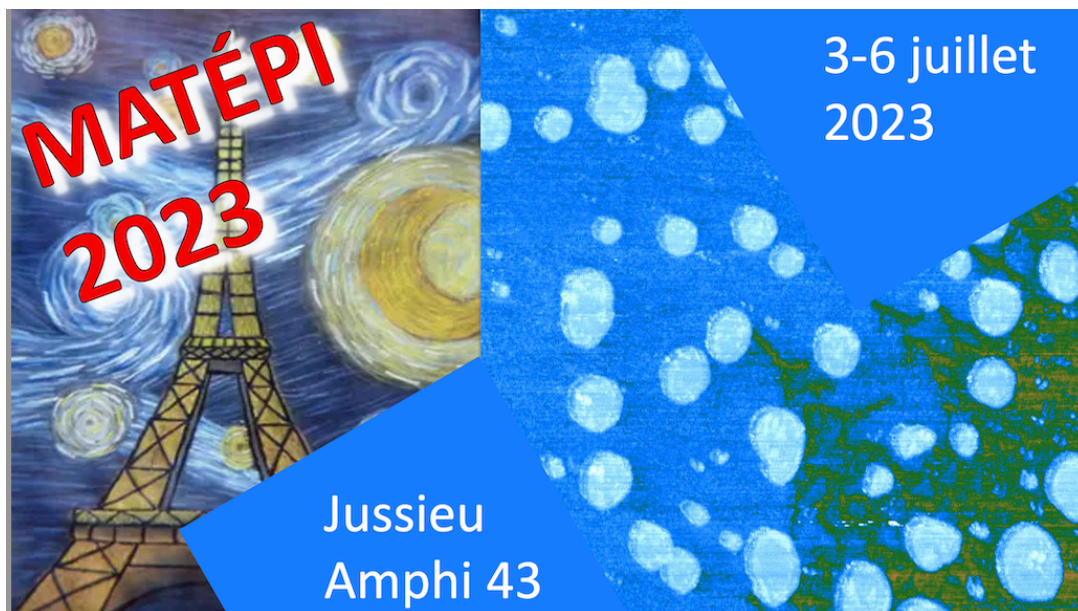


Conférence MATÉPI2023
Paris, 3-6 Juillet 2023

PROGRAMME



Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

| Lundi 3 juillet | | |
|-----------------|---|---|
| 12h45-13h | Introduction | |
| 13h-14h50 | Axe 1 : Modélisation et prédiction Charles CORNET, Anne HEMERYCK, Olivier PIERRE-LOUIS | |
| 13h-13h30 | Antoine JAY | A study based on first principles to understand the mechanisms involved in the formation of interfaces during the growth of materials |
| 13h30-13h50 | Anne PONCHET | Mode de croissance et formes d'équilibre de coquilles d'or sur des cœurs de fer |
| 13h50-14h10 | Frank GLAS | The incomplete monolayer regime and the mixed regime of nanowire growth |
| 14h10-14h30 | Jean-Noël AQUA | Mécanismes de croissance des matériaux 2D : le point de vue des simulations Monte Carlo cinétique |
| 14h30-14h50 | Philippe VENNÉGUÉS | Origine du twist entre les îlots de croissance de semi-conducteurs tétra-coordonnés hétéroépitaxiés selon des directions hexagonales |
| 14h50 - 15h10 | PAUSE CAFÉ | |
| 15h10-17h | Axe 9 : Enjeux Industriels: du matériau au dispositif Jean DECOBERT, Fabien DEPRAT, Arnaud HOUEL | |
| 15h10-15h40 | Marvin FRAUENRATH | GeSn – A potential low cost direct-bandgap alternative to III-V semiconductors for co-integration in Si-CMOS |
| 15h40-16h | Jérémy VIVES | Development of epitaxial growth and quantification of SiGeC for industrial applications |
| 16h-16h20 | Justine LESPIAUX | Selective Epitaxial Growth of Si:P and SiGe:B in cavities in an industrial environment |
| 16h20-16h40 | Fabien DEPRAT | Epitaxy for the Heterojunction Bipolar Transistors : Possible ways of improvement |
| 16h40-17h | Claire BESANCON | L'intégration de semi-conducteurs III-V sur silicium par collage et recroissance pour les télécommunications optiques à haut débit |
| 17h-18h | PRÉSENTATION FLASH DES POSTERS | |
| Mardi 4 juillet | | |
| 9h-11h20 | Axe 2 : Épitaxie sous fortes interactions Yvon CORDIER, Ulrike LÜDERS, Jean-Baptiste RODRIGUEZ, Guillaume SAINT-GIRONS | |
| 9h-9h30 | Thomas MAROUTIAN | Phases of epitaxial ferroelectric ZrO2 thin films |
| 9h30-10h | Gilles PATRIARCHE | (titre à venir) |
| 10h-10h20 | Eva DESGUÉ | PtSe2 films grown by molecular beam epitaxy for high frequency optoelectronics |
| 10h20-10h40 | Sébastien SAIITZEK | Croissance épitaxiale par ablation laser pulsé de films minces de Ln2Ti2O7 |
| 10h40-11h | Audrey GILBERT | Distribution initiale de phase et enfouissement des domaines d'antiphase lors de la croissance de III-Vs sur Si(001) |
| 11h-11h20 | Gabriel FERRO | Effet de la polarité du substrat 4H-SiC sur la croissance hétéroépitaxiale du carbure de bore BxC par CVD |
| 11h20-11h50 | PAUSE CAFÉ | |
| 11h50-12h50 | Axe 3 : Épitaxie sous faibles interactions (van der Waals) Mathieu JAMET, Adrien MICHON, Geoffroy PREVOT | |
| 11h50-12h20 | Hanako OKUNO | Transmission electron microscopy for the study of epitaxially grown 2D materials |
| 12h20-12h50 | Fabrice OEHLER | CVD growth of WSe2 mono- and bi-layers |
| 12h50-14h | DÉJEUNER | |
| 14h-16h (suite) | Axe 3 : Épitaxie sous faibles interactions (van der Waals) Mathieu JAMET, Adrien MICHON, Geoffroy PREVOT | |
| 14h-14h20 | Rémi LAZZARI | Preuve de l'existence de clusters monocouche d'Ag épitaxiés à la surface α -Al2O3(0001) |
| 14h20-14h40 | Pierre MALLET | Etats hybrides monoplan PtSe2 - graphène: rôle de l'angle de tilt interfacial |
| 14h40-15h | Adrien MICHON | Croissance de graphène par CVD sous hydrogène pour les applications |
| 15h-15h20 | Geoffroy PREVOT | Mécanismes de croissance des couches épitaxiales de Xènes révélés par microscopie à effet tunnel in-situ en temps réel |
| 15h20-15h40 | Enguerrand TOURARD | Quasi Van der Waals epitaxy of cadmium telluride on 2D materials |
| 15h40-16h | Aly ZAÏTER | Growth of (Al, Ga)N Quantum Dots on h-BN and Exfoliation Processes towards the Fabrication of Flexible Efficient UV-C LEDs |
| 16h-16h30 | PAUSE CAFÉ | |
| 16h30-18h30 | SESSION POSTER | |

Conférences invitées



Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

| Mercredi 5 juillet | | |
|--------------------|---|--|
| 9h-10h50 | Axe 4 : Développements instrumentaux et caractérisations ex-situ In-situ Alexandre ARNOULT, Paola ATKINSON, Patrick LE FÈVRE, Danièle PIERRE | |
| 9h-9h30 | Nicolas REYREN | Characterization of spin-polarized surface states |
| 9h30-9h50 | Danièle PIERRE | Études de nanomatériaux sous UHV : de la croissance multi-matériaux à l'analyse multi-techniques |
| 9h50-10h10 | Hocine KHEMLICHE | Real-time characterization of the UHV growth of MAPbI ₃ by Grazing Incidence Fast Atom Diffraction |
| 10h10-10h30 | Patrick LEFEVRE | Hétérostructures TMD/Ferroélectrique – Influence de la polarisation du ferroélectrique sur la structure électronique du TMD |
| 10h30-11h | PAUSE CAFÉ | |
| 11h-12h20 | Axe 5 : Épitaxie de nanostructures et de nouveaux systèmes Yamina ANDRÉ, Stefano CURIOTTO, Ludovic DESPLANQUE, Amélie DUSSAIGNE, Sébastien PLISSARD | |
| 11h-11h30 | Geoffrey AVIT | Selective area growth of well-ordered (In,Ga)N nanowires grown by HVPE |
| 11h30-11h50 | Nicolas CHAIZE | Réalisation de nanostructures HgTe/CdTe (001) par épitaxie sélective |
| 11h50-12h20 | Frédéric LEROY | Nanodomains ferroélectriques dans GeTe épitaxié sur Si(111) |
| 12h20-14h | DÉJEUNER | |
| 14h-15h (suite) | Axe 5 : Épitaxie de nanostructures et de nouveaux systèmes Yamina ANDRÉ, Stefano CURIOTTO, Ludovic DESPLANQUE, Amélie DUSSAIGNE, Sébastien PLISSARD | |
| 14h-14h20 | Antoine PEDECHES | Étude des propriétés de films minces de Niture de Niobium épitaxiés par EJM sur substrat silicium via un buffer (Al, Ga)N |
| 14h20-14h40 | Dyhia TAMSAOUT | Two step growth procedure for homogeneous GaN NW arrays on graphene |
| 14h40-15h | Jonathan HENRIQUES | Croissance de micro-domaines GaN organisés sur graphène |
| 15h-16h20 | Axe 6 : Couplage épitaxie / propriétés Benjamin DAMILANO, Noëlle GOGNEAU, Lisa MICHEZ | |
| 15h-15h30 | Charles GUILLEMARD | Experimental Study of Half-Metal Magnets Co ₂ MnZ Heusler Epitaxial Films and Related Super-Lattices |
| 15h30-16h | Frank VIDAL | Growth, structure and magnetic properties of CoNi-SrTiO ₃ vertically self-assembled epitaxial nanostructures |
| 16h-16h30 | PAUSE CAFÉ | |
| Jeudi 6 juillet | | |
| 9h-10h20 (suite) | Axe 6 : Couplage épitaxie / propriétés Benjamin DAMILANO, Noëlle GOGNEAU, Lisa MICHEZ | |
| 9h-9h20 | Gustavo AFONSO | Intégration par SAG de plusieurs lasers SIBH-DFB optimisée sur une plage >100 nm dans la bande O |
| 9h20-9h40 | Simon LITSCHGI | Impact of InGaN quantum well thickness on carriers lateral diffusion length |
| 9h40-10h | Lisa MICHEZ | Epitaxy-driven alternating magnetic phase in Mn ₂ Si ₃ thin films |
| 10h-10h20 | José PENEULAS | Hexagonal Ge on self-assisted GaAs Nanowires for light emission |
| 10h20-10h50 | PAUSE CAFÉ | |
| 10h50-12h50 | Axe 8 : Fonctionnalisation des matériaux Catherine MARICHY, Laurence MÉCHIN | |
| 10h50-11h20 | Adrien CARRETERO | Technologie des couches tampons en quartz épitaxié sur silicium pour des dispositifs d'oxyde intégrés durables et à grande échelle |
| 11h20-11h40 | Laurence MÉCHIN | Epitaxial La _{2/3} Sr _{1/3} MnO ₃ thin films on buffered silicon substrates for high-performance uncooled infrared bolometers |
| 11h40-12h | Gurvan BRASSE | Croissance en solution par épitaxie en phase liquide de couches minces cristallines de fluorures dopés terres-rares pour des applications laser |
| 12h-12h30 | Amadou NDIAYE | L'utilité de la fonctionnalisation des matériaux carbonés dans la conception de capteurs dédiés à la détection de polluants atmosphériques |
| 12h30-12h50 | Gabriel FERRO | Structuration de surface du 4H-SiC en macro-marches parallèles à partir d'un sandwich SiC/Si(liq)/SiC |
| 12h50-14h | DÉJEUNER | |
| 14h-16h10 | Axe 7: Propriétés ultimes et systèmes épitaxiés pour l'ingénierie quantique Michele AMATO, Hélène CARRERE, Manuel HOUZET | |
| 14h-14h30 | Simone ASSALI | Isotope- and strain-engineered germanium quantum wells |
| 14h30-15h | Andrea BALOCCHI | Photodétecteur de la polarisation de la lumière par recombinaison dépendante du spin dans les nitures dilués |
| 15h-15h20 | Joël CIBERT | II-VI quantum dots in nanowires: tools to fine-tune optical properties |
| 15h20-15h40 | Edith BELLET-ALMARIC | InAs/ZnTe core-shell nanowires for hybrid superconductor-semiconductor structures |
| 15h40-16h10 | Michele RE FIORENTIN | Theoretical Insights into 2D Materials for Optoelectronic Applications |

LUNDI 3 JUILLET

Lundi 13h – 13h20

Introduction

Jean-Noël AQUA, Mathieu ABEL, Thierry BARON, Laurence MECHIN

Lundi 13h20 – 14h50

Axe 1 : Modélisation et prédiction

Charles CORNET, Anne HEMERYCK, Olivier PIERRE-LOUIS

Lundi 13h20 – 13h50

A study based on first principles to understand the mechanisms involved in the formation of interfaces during the growth of materials

Antoine Jay^{1*}, Anne Hémercyck¹

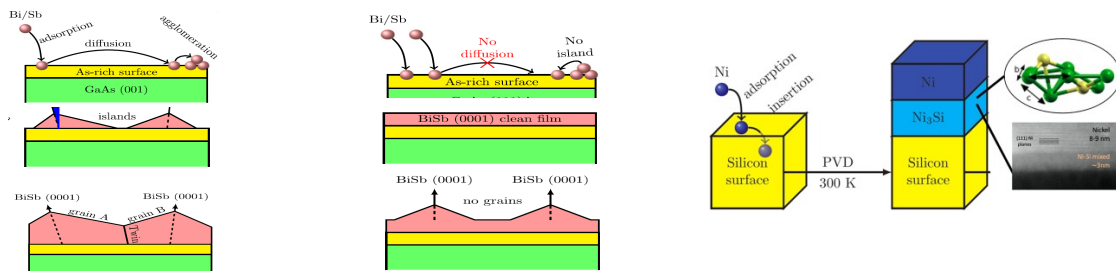
¹ LAAS-CNRS, Université de Toulouse, CNRS, Toulouse, France

* antoine.jay@laas.fr

The growth mode of epitaxial processes is influenced by the interactions between the deposited material and the surface. When the deposited atoms do not penetrate the surface, different growth modes can be observed such as the Volmer-Weber mode, characterized by the formation of islands with varying orientations on the surface, and the Stranski-Krastanov mode, where a clean two-dimensional interface is formed. On the other hand, when the deposited atoms penetrate the surface, a composite alloy with intermediate concentrations can be observed.

To accurately predict the specific growth mode, ab initio calculations based on density functional theory (DFT) provide valuable insights into the formation energies and energy barriers of each deposition step, which respectively govern the thermodynamics and kinetics of the growth process.

In this presentation, we present DFT predictions for each of the mentioned growth modes detailing the growth of Bi on GaAs(001) and Bi on GaAs(111)A, and Ni on Si(001). Furthermore, we explore the steric and electronic factors that explain the observed variations in the calculated energies. Overall, our findings underscore the significance of comprehensive ab initio calculations in understanding and controlling epitaxial growth modes. These insights are crucial for the design and optimization of advanced thin film structures.



Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

[1] Growth of BiSb on GaAs (001) and (111)A surfaces: A joint experimental and theoretical study, D. Sadek *et al.*, *App. Surf. Sc.*, 622, 156688 (2023)

[2] A comprehensive atomistic picture of the as-deposited Ni-Si interface before thermal silicidation process, C. Jara Donoso *et al.*, *App. Surf. Sc.*, **631**, 157563 (2023)

Lundi 13h50 – 14h10

The incomplete monolayer regime and the mixed regime of nanowire growth

Frank Glas

Université Paris-Saclay, CNRS, Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies, Palaiseau

[*frank.glas@c2n.upsaclay.fr](mailto:frank.glas@c2n.upsaclay.fr)

The vapor-solid-liquid (VLS) growth of semiconductor nanowires (NWs) generally proceeds via the addition of biatomic monolayers (MLs) at the interface between the NW stem and an apical liquid catalyst nanodroplet. Here, we focus on III-V NWs with a non-truncated (planar) interface, which implies that the material feeding ML extension originates only from the liquid phase.

In situ TEM shows that each ML cycle then consists of three stages: (1) nucleation of a 2D island and quasi-instantaneous formation of a *fractional* ML, (2) slower propagation of the ML until completion (duration p), (3) waiting time w before next nucleation [1,2]. This indicates that, at nucleation, the droplet contains less than 1 ML worth of the volatile group V element, which forms the partial ML (stage 1), while at stage 2 group V atoms brought steadily by the vapor serve to extend the ML but not to enrich the liquid, which remains at equilibrium with the solid [3,4]. Droplet refills only during stage 3.

In principle, stage 2 may vanish. We call *incomplete monolayer (IML) regime* the growth mode where this does not occur for any ML, *i.e.* where $p \neq 0$ for all MLs. By coupling growth modelling to *in situ* MBE growth, we previously showed that, at low temperature (without group V desorption from the liquid), this should result in a self-regulated quasi-deterministic growth whereby, despite stochastic nucleation, each ML cycle (between ML completions) lasts exactly the same time $\tau_c = w + p$, with propagation time p compensating the fluctuations of waiting time w [2]. Since this is favorable for controlling NW uniformity and NW heterostructures, it appears crucial to investigate under which growth conditions the IML regime prevails.

To this end, we study theoretically the alternative *mixed regime*, where only part of the nucleation events give rise to the initial formation of an incomplete ML. The IML regime is clearly a limit case of mixed regime. We first find the boundary between IML and proper mixed regimes, in terms of NW geometry and growth conditions. We then calculate the density of probability of the nucleation probability, as a function of group V concentration x in the liquid, and show that the statistics of all characteristic times (w , p , τ_c) can be obtained from this function. These calculations are performed semi-analytically, without any growth simulation. Moreover, whereas our previous analytical calculations were restricted to the IML regime and to low temperature [2], we now take desorption from the liquid into account. The calculations are thus valid at any temperature, and we also consider three possible nucleation loci on the NW top facet as well as the Gibbs-Thomson and Kelvin small size effects.

The mixed regime can then be characterized quantitatively in many ways, which allows us to discuss its domain of occurrence and properties. We can in particular compute the fraction of nucleation events giving rise to an incomplete ML. This leads us to investigate a *quasi-IML regime* where, although the conditions for the IML regime are not strictly met, the fraction of nucleation events giving rise to a complete ML is low. We discuss the origin, the characteristics and the potential interest of this regime.

[1] J.-C. Harmand, G. Patriarche, F. Glas, F. Panciera, I. Florea, J.-L. Maurice, L. Travers, Y. Ollivier, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 166101 (2018).

[2] F. Glas, F. Panciera, J.-C. Harmand, *Phys. Status Solidi RRL* **16**, 2100647 (2022).

[3] V. G. Dubrovskii, *Cryst. Growth Des.* **17**, 2589 (2017).

[4] F. Glas, V. G. Dubrovskii, *Phys. Rev. Mater.* **4**, 083401 (2020).

Lundi 14h10 – 14h30

Mécanismes de croissance des matériaux 2D : le point de vue des simulations Monte Carlo cinétique

Jean-Noël Aqua^{1*}, Kejian Liu², Geoffroy Prevot¹, Zouhour Ben Jabra², Mathieu Abel², Isabelle Berbezier², Adrien Michon³

¹ INSP, Sorbonne Université, 4 place Jussieu, 75005 Paris

² IM2NP, CNRS, Avenue Escadrille Normandie-Niemen, 13397 Marseille



Une voie prometteuse pour l'intégration des matériaux 2D (2DM) est leur production par épitaxie qui reste un verrou technologique pour toute application industrielle potentielle de ces systèmes. La synthèse du silicène et du germanène par épitaxie a été rapportée pour la première fois sur des substrats métalliques. Cependant, leurs propriétés ont été fortement affectées par le couplage avec leur substrat et des effets de mélange entre le substrat et le film 2D ont été révélés dans certaines conditions. En outre, la fabrication de dispositifs électroniques fonctionnels nécessite des supports non métalliques. Une possibilité est d'introduire une couche tampon pour découpler la couche 2D du substrat, comme cela a été récemment proposé. Des expériences récentes concernant la croissance épitaxiale de Si sur du graphite pyrolytique ont révélé la possibilité de faire croître soit des flocons 2D de taille relativement petite, soit des îlots fractals dépoussiérés. Dans tous les cas, la compréhension et le contrôle de la croissance épitaxiale des matériaux 2D sont largement insuffisants, et les progrès actuels sont limités par l'absence de croissance uniforme à l'échelle de la plaquette, ce qui nécessite une étude plus approfondie des mécanismes dynamiques.

Pour progresser dans cette direction, nous avons développé des simulations Monte-Carlo cinétiques (kMC) de l'épitaxie du silicène sur différents substrats (graphène, Ag(111) ...). Les calculs ab-initio ont révélé la stabilité de certaines structures, mais la description dynamique de leur croissance qui dicte les formes résultantes est encore insuffisante. Le défi consiste à simuler des systèmes hors équilibre de taille suffisante (typiquement de l'ordre d'une centaine de nanomètres) tout en incorporant des détails atomiques, sur des temps suffisamment longs (typiquement de l'ordre d'une minute ou plus) tout en décrivant des événements atomiques (diffusion, incorporation, échange...). Nous montrerons comment la cinétique de croissance peut déterminer les formes résultantes et la possibilité de contrôler la qualité des matériaux 2D.

Lundi 14h30 – 14h50

**Origine du twist entre les îlots de croissance de semi-conducteurs tétra-coordonnés
hétéroépitaxiés selon des directions hexagonales**

P. Vennéguès¹, L. Largeau², V. Brändli¹, B. Damilano¹, K. Tavernier³, R. Bernard³, A. Courville¹, S. Rennesson¹, F. Semon¹, G. Feuillet and C. Cornet³

¹ Université Côte d'Azur, CRHEA-CNRS, rue B. Grégory, F-06560 Valbonne, France

²C2N-CNRS / Université Paris-Sud - Université Paris-Saclay, 10 Boulevard Thomas Gobert, 91120 Palaiseau, France

³ Univ Rennes, INSA Rennes, CNRS, Institut FOTON – UMR 6082, F-35000 Rennes, France

L'hétéroépitaxie sur un substrat fortement désaccordé (grande différence de paramètres de maille, différence de nature chimique etc...) conduit très souvent à une nucléation 3D. Les désaccords entre îlots de croissance conditionnent fortement les propriétés microstructurales (distribution des dislocations, tilt, twist...) des couches finales. On peut notamment obtenir des couches colonnaires, les colonnes reproduisant les désorientations entre îlots. Le but de cette étude est d'expliquer les désorientations dans le plan de croissance (twist) entre îlots dans le cas de semi-conducteurs tétra-coordonnés hétéroépitaxiés selon des orientations hexagonales. Ceci concerne notamment les matériaux de structure wurzite épitaxiés selon la direction (0001) tels que les III-N et les alliages à base de ZnO mais également les matériaux de structure sphalerite épitaxiés selon la direction (111) tels que les III-V « classiques ».

Dans une première partie nous présenterons un modèle simple qui permet de relier quantitativement la distribution de twist au désaccord paramétrique. Le twist est dû à la distribution aléatoire des composantes vis du réseau de dislocations 60° introduit dans l'interface pour compenser le désaccord paramétrique, le twist maximum augmentant avec le désaccord paramétrique.

Dans une seconde partie, ce modèle sera vérifié expérimentalement sur 5 systèmes présentant une gamme de désaccords paramétriques allant de 4 à 19% : GaAs/Si, InP/Si, InAs/Si, AlN/saphir et AlN/Si. Les observations en microscopie électronique en transmission (vues planes (voir figure) et sections transverses) et les mesures de diffraction des Rayons X en incidence rasante permettent de valider le modèle proposé pour 4 des systèmes étudiés. Pour GaAs/Si, les îlots de croissance observés ne sont pas relaxés, le modèle n'est donc pas applicable.

Le twist entre îlots de croissance est donc directement relié au désaccord paramétrique et est donc une propriété intrinsèque à chaque système hétéroépitaxial.

La coalescence des îlots désorientés entraîne la formation de dislocation. Leur densité dans les premières étapes de coalescence est reliée au twist entre îlots (propriété intrinsèque) et à leur densité (dépendant des conditions de

Conférence MATÉPI2023

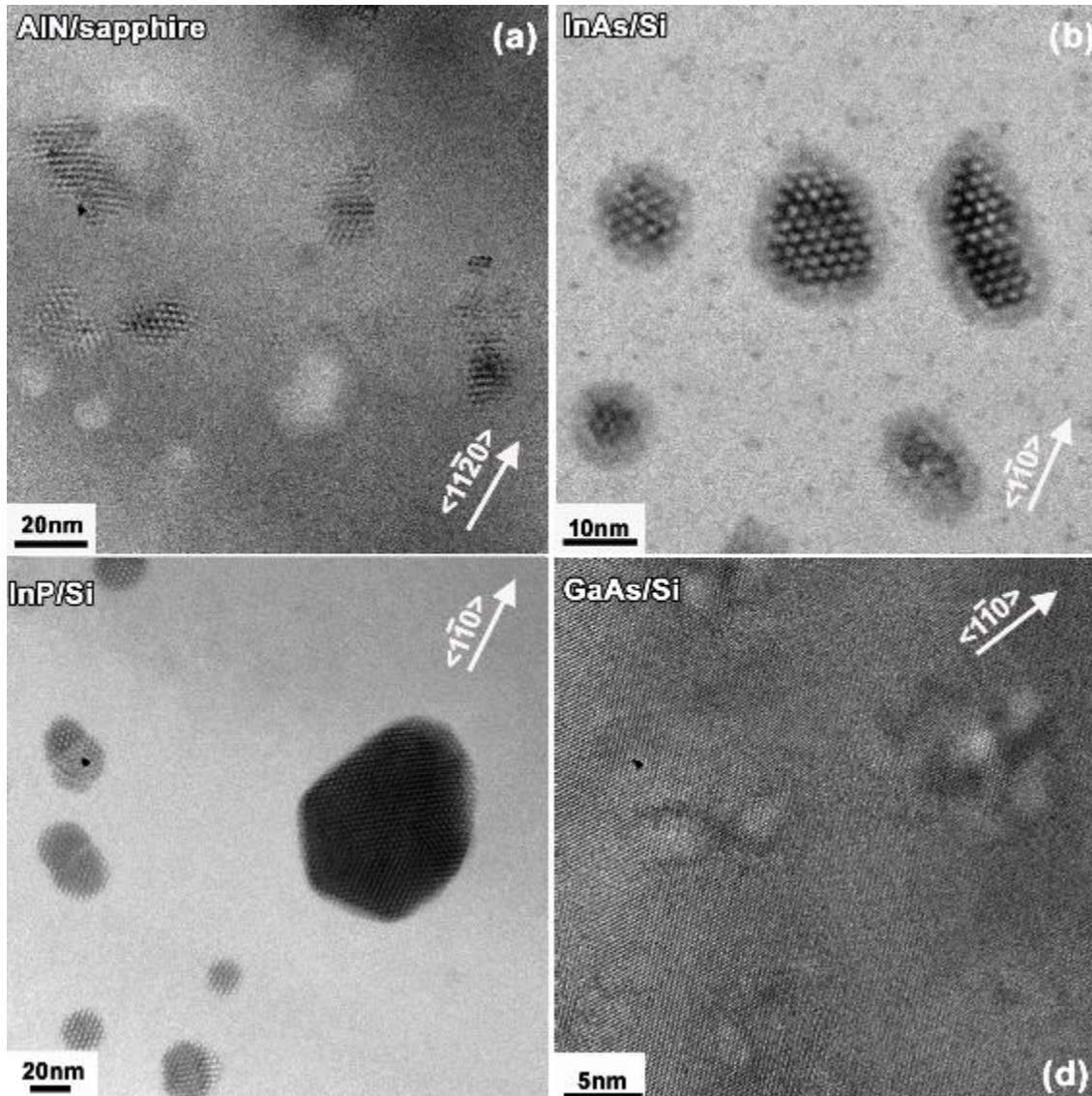
Paris, 3-6 Juillet 2023

croissance). Diminuer la densité de dislocations initiale nécessite de diminuer la densité d'îlots, l'obtention de couches lisses se faisant alors à plus grande épaisseur de dépôt.

[1] N. Mante, S. Rennesson, E. Frayssinet, L. Largeau, F. Semond, J. L. Rouvière, G. Feuillet, and P. Vennéguès, J. Appl. Phys. 123, 215701, (2018).

[2] P. Vennéguès, L. Largeau, V. Brändli, B. Damilano, K. Tavernier, R. Bernard, A. Courville, S. Rennesson,

[3] F. Semond, G. Feuillet, and C. Cornet, J. Appl. Phys. 132, 165102, (2022).



Images de microscopies en vue plane des îlots de croissance pour 4 systèmes hétéroépitaxiés. La présence de Moirés pour les 3 premiers systèmes montre que les îlots sont relaxés.

Lundi 15h10 – 17h

Axe 9 : Enjeux industriels: du matériau au dispositif
Jean DECOBERT, Fabien DEPRAT, Arnaud HOUEL

Lundi 15h10 – 15h40

GeSn – A potential low cost direct-bandgap alternative to III-V semiconductors for co-integration in Si-CMOS

M. Frauenrath^{1*}, P. Acosta-Alba³, J. Vives¹, F. Deprat¹, D. Buca², J.-M. Hartmann³

¹ STMicroelectronics, 38920, Crolles, France

² Peter Grünberg Institute (PGI-9) and JARA-Fundamentals of Future Information Technologies, Forschungszentrum Jülich, Jülich, Germany

³ Univ. Grenoble Alpes, CEA, LETI, 38000 Grenoble, France

* marvin.frauenrath@st.com

Future imaging technologies depend on the development of more efficient light emitting/absorbing materials, requiring development beyond the established, mature Si manufacturing platform. The Si platform is limited by its indirect band gap. This limitation can be overcome by the introduction of III-V semiconductors, which exhibit superior optoelectronic properties thanks to their direct band gap. To date, the limited wafer size of III-V materials (3 or 4 inch) results in high manufacturing costs that are not feasible for large scale implementation, and III-V foundries lack in maturity compared to Si-based platforms [1], [2]. In addition, flip-chip or wafer bonding suffers from alignment and integration density issues [3], [4]. Recent developments in dilute nitride materials such as GaNAsP on Si [5], [6] or other heteroepitaxy strategies [7] may facilitate the introduction of III-V materials into the Si manufacturing platform.

However, the introduction of III-V materials into the Si manufacturing platform requires significant investment. Recently, optically pumped lasing at room temperature [8], [9] and electrically pumped lasing up to 100°K [10]–[12] have been demonstrated in group IV GeSn thanks to its direct band gap by tensile straining and/or Sn alloying of germanium. This solution would provide efficient light emitting/absorbing materials for certain optoelectronic applications with a lower cost of integration into Si fabrication platforms.

To facilitate the co-integration of GeSn on 300 mm Si wafers, certain challenges must be overcome. In particular, growth temperatures below 400°C and high growth rate precursors result in Sn contents up to 17% [9], well above the equilibrium solid solubility of Sn in Ge of 1% [13]. The large lattice mismatch of 14% between Si and GeSn is overcome by using Ge Strain Relaxed Buffers (SRB) [14] and strain engineering by growing step-graded GeSn heterostructures on top of Ge SRBs [8]. Microstructuring GeSn into small microdisks with diameters of a few μm can drastically limit Sn segregation and enhance photoluminescence [15]. Efficient doping can be achieved by alloying GeSn with Si, resulting in n- and p-type doping concentrations in the range of a few 10^{20} cm^{-3} [16].

These GeSn layers are not only interesting for optoelectronic applications, they can also be used in vertical GeSn nanowire MOSFETs for CMOS [17], as thermoelectrics [18], or to highly tensile strain Ge for novel quantum applications using the light hole ground state [19].

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

- [1] R. Soref, "The Past, Present, and Future of Silicon Photonics," *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, vol. 12, no. 6, pp. 1678–1687, Dec. 2006, doi: 10.1109/JSTQE.2006.883151.
- [2] R. R. Schaller, "Moore's law: past, present and future," *IEEE Spectr.*, vol. 34, no. 6, pp. 52–59, Jun. 1997, doi: 10.1109/6.591665.
- [3] G. Roelkens *et al.*, "III-V/Si photonics by die-to-wafer bonding," *Mater. Today*, vol. 10, no. 7, pp. 36–43, Jul. 2007, doi: 10.1016/S1369-7021(07)70178-5.
- [4] M. Tang *et al.*, "Integration of III-V lasers on Si for Si photonics," *Prog. Quantum Electron.*, vol. 66, pp. 1–18, Aug. 2019, doi: 10.1016/j.pquantelec.2019.05.002.
- [5] B. Kunert, K. Volz, and W. Stolz, "Dilute nitride Ga(NAsP)/GaP-heterostructures: toward a material development for novel optoelectronic functionality on Si-substrate," *Phys. Status Solidi B*, vol. 244, no. 8, pp. 2730–2739, Aug. 2007, doi: 10.1002/pssb.200675609.
- [6] K. Volz, P. Ludewig, and W. Stolz, "Chapter Six - Monolithic integration of lattice-matched Ga(NAsP)-based laser structures on CMOS-compatible Si (001) wafers for Si-photonics applications," in *Semiconductors and Semimetals*, S. Lourdudoss, J. E. Bowers, and C. Jagadish, Eds., Elsevier, 2019, pp. 201–227. doi: 10.1016/bs.semsem.2019.07.003.
- [7] B. Shi and J. Klamkin, "Defect engineering for high quality InP epitaxially grown on on-axis (001) Si," *J. Appl. Phys.*, vol. 127, no. 3, p. 033102, Jan. 2020, doi: 10.1063/1.5127030.
- [8] J. Chrétién *et al.*, "Room temperature optically pumped GeSn microdisk lasers," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 120, no. 5, p. 051107, Jan. 2022, doi: 10.1063/5.0074478.
- [9] A. Bjelajac *et al.*, "Up to 300 K lasing with GeSn-On-Insulator microdisk resonators," *Opt. Express*, vol. 30, no. 3, pp. 3954–3961, Jan. 2022, doi: 10.1364/OE.449895.
- [10] Y. Zhou *et al.*, "Electrically injected GeSn lasers on Si operating up to 100 K," *Optica*, vol. 7, no. 8, pp. 924–928, Aug. 2020, doi: 10.1364/OPTICA.395687.
- [11] Y. Zhou *et al.*, "Electrically injected GeSn lasers with peak wavelength up to 2.7 μm ," *Photonics Res.*, vol. 10, no. 1, pp. 222–229, Jan. 2022, doi: 10.1364/PRJ.443144.
- [12] B. Marzban *et al.*, "Strain Engineered Electrically Pumped SiGeSn Microring Lasers on Si," *ACS Photonics*, Dec. 2022, doi: 10.1021/acsp Photonics.2c01508.
- [13] F. A. Trumbore, "Solid Solubilities and Electrical Properties of Tin in Germanium Single Crystals," *J. Electrochem. Soc.*, vol. 103, no. 11, p. 597, 1956, doi: 10.1149/1.2430167.
- [14] J. M. Hartmann, "Assessment of the growth/etch back technique for the production of Ge strain-relaxed buffers on Si," *J. Cryst. Growth*, 2018.
- [15] V. Bonino *et al.*, "Microstructuring to Improve the Thermal Stability of GeSn Layers," *ACS Appl. Mater. Interfaces*, vol. 14, no. 19, pp. 22270–22277, May 2022, doi: 10.1021/acsaami.2c01652.
- [16] M. and C. Frauenrath Omar and Gauthier, Nicolas and Nolot, Emmanuel and Buca, Dan and Hartmann, Jean-Michel, "Advances in In Situ Boron and Phosphorous Doping of SiGeSn," *ECS J. Solid State Sci. Technol.*, 2023, [Online]. Available: <http://iopscience.iop.org/article/10.1149/2162-8777/acd720>
- [17] M. Liu *et al.*, "Vertical GeSn nanowire MOSFETs for CMOS beyond silicon," *Commun. Eng.*, vol. 2, no. 1, p. 7, Feb. 2023, doi: 10.1038/s44172-023-00059-2.
- [18] D. Spirito *et al.*, "Thermoelectric Efficiency of Epitaxial GeSn Alloys for Integrated Si-Based Applications: Assessing the Lattice Thermal Conductivity by Raman Thermometry," *ACS Appl. Energy Mater.*, vol. 4, no. 7, pp. 7385–7392, Jul. 2021, doi: 10.1021/acsaem.1c01576.
- [19] S. Assali, A. Attiaoui, P. D. Vecchio, S. Mukherjee, J. Nicolas, and O. Moutanabbir, "A Light-Hole Germanium Quantum Well on Silicon," *Adv. Mater.*, vol. 34, no. 27, p. 2201192, Jul. 2022, doi: 10.1002/adma.202201192.

Lundi 15h40 – 16h

Development of epitaxial growth and quantification of SiGeC for industrial applications

Jeremy Vives^{1*}, Fabien Deprat¹, Stephane Verdier¹, Marvin Frauenrath¹, Romain Duru¹, Marc Juhel¹,

Gregory Berthome², Didier Chaussende²

¹ STMICROELECTRONICS, 38920, Crolles, France

² Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, SIMaP, 38000 Grenoble, France

* jeremy.vives@st.com

To advance and achieve the desired performance of state-of-the-art devices for industrial applications, it is necessary to tailor the structural, electronic, optical, chemical, and mechanical properties by incorporating germanium (Ge) and carbon (C) into silicon (Si) [1]. Devices such as Hetero-junction Bipolar Transistors [2], strained channel Complementary Metal Oxide Semiconductor devices [3], Infra-Red photo-detectors, Raised Sources and Drains [4], Micro-Electro-Mechanical Systems, and virtual substrates for III-V integration would benefit from such tailoring. However, the growth of Si_{1-y}Cy or Si_{1-x-y}GexCy alloys is very challenging because it requires overcoming the thermodynamic equilibrium solid solubility of C in solid Si to 10⁻⁴ at% at 1400 °C [5] and probably even lower in Ge [6]. Therefore, non-equilibrium growth methods such as molecular beam epitaxy (MBE) [7] or chemical vapor deposition (CVD) [8] are mandatory to grow Si_{1-y}Cy or Si_{1-x-y}GexCy films with carbon concentrations of several percent. Carbon can be incorporated into both the substitutional (C_{sub}) and interstitial (C_{int}) sites of the lattice. In general, the total carbon concentration is limited by a threshold above which carbon atoms begin to incorporate into interstitial sites in the SiGe lattice. This threshold is strongly dependent on the process parameters. The interstitial carbon atoms are not only highly mobile, but they can also form complexes with other impurities or defects (doping impurities, oxygen, silicon self-interstitial or substitutional carbon), creating recombination centers. These complexes are also associated with the formation of precipitates and the nucleation of a variety of crystal defects [9]. It has been shown that low growth temperatures and high growth rates favor the incorporation of C into substitutional sites [10–12]. To date, the quantification of total (C_{tot}), substitutional (C_{sub}) and interstitial (C_{int}) carbon concentrations was achieved by a cumbersome combination of secondary ion mass spectrometry (SIMS) and X-ray diffraction (XRD), based on elaborate calibration and appropriate preparation. For the same process parameters (temperature, pressure, Ge content), disilane (Si₂H₆) results in almost twice the substitutional carbon concentration when compared to the more conventional silane (SiH₄) silicon precursor with germane (GeH₄) as germanium precursor. To study carbon incorporation on an industrial scale, a novel and original approach is



Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

developed to detect and quantify carbon atoms in different chemical states in a single, non-destructive clean room measurement. Finally, with the aim of integrating these epitaxial layers into a device, the influence of the incorporation of C on the nucleation properties and diffusion of P has been studied.

- [1] D. Dutartre, *ECS Transactions*, 2016, **75**, 303-323
- [2] K. Ehwald et al, *International Electron Devices Meeting*, 1999, Technical Digest, 561-564
- [3] J. M. Hartmann et al, *J. Appl. Phys*, 2022, **92**, 2368-2373
- [4] J. M. Hartmann et al, *Semicond. Sci. Technol*, 2013, **28**
- [5] R.W. Olesinski et al, *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, 1984, **5**, 486-489
- [6] R.W. Olesinski et al, *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, 1984, **5**, 484-486
- [7] K. Eberl et al, *Appl. Phys. Lett*, 1992, **60**, 3033-3035
- [8] J. Mi et al, *Appl. Phys. Lett*, 1995, **67**, 259-261
- [9] H. J. Osten et al, *Semicond. Sci. Technol*, 1996, **11**, 1678-1687
- [10] V. Loup et al, *J. Vac. Sci. Technol B*, 2003, **21**, 246-253
- [11] H. J. Osten et al, *J. Appl. Phys*, 1996, **80**, 6711-6715
- [12] J. Vives et al, *ECS Transactions*, 2022, **109**, 237-248

Lundi 16h – 16h20

Selective Epitaxial Growth of Si:P and SiGe:B in cavities in an industrial environment

Justine Lespiaux^{1,2}, Fabien Deprat², Maxime Lepage¹, Romain Duru¹, Alexia Valéry², Christophe Charles², Denis Mariolle¹, David Cooper¹, Jean-Michel Hartmann¹

¹Univ. Grenoble Alpes, CEA, LETI, 38000, Grenoble, France

²STMicroelectronics, 38920, Crolles, France

* justine.lespiaux@cea.fr

Epitaxy is becoming key for the fabrication of ever more complex microelectronic devices. The aim of this process is to have ultra-high crystalline quality layers even when growth is carried out in thin structures. In this work, we present features of selective epitaxy (SEG) in cavities, ranging from material challenges occurring during the process to the implementation of characterizations and integration in microelectronic devices. SEG of N-doped Si can for instance be used in high aspect ratio vertical trenches to improve uniformity of dopants compared to ionic implantation. Although multiple difficulties were encountered such as growth inhomogeneities along sidewalls or defect formation (voids) due to premature closing at the top of trenches, 1:6 aspect ratio vertical cavities were filled thanks to a multiple step process with various DCS/HCl Mass-Flow Ratios (MFRs) [1] (Fig.1(a)). 3D FIB-SEM was appropriate to detect small filling defects, enabling the whole three-dimensional structure observation. Cross-sectional TEM images showed the good crystalline quality of the epitaxy growth. The combination of SIMS, SCM (Fig.1(b)) and off-axis electron holography confirmed the doping uniformity achievable with such a process. Some modifications were implemented to obtain a smooth wafer surface when using it for the fabrication of an image pixel (Fig.1(c)).

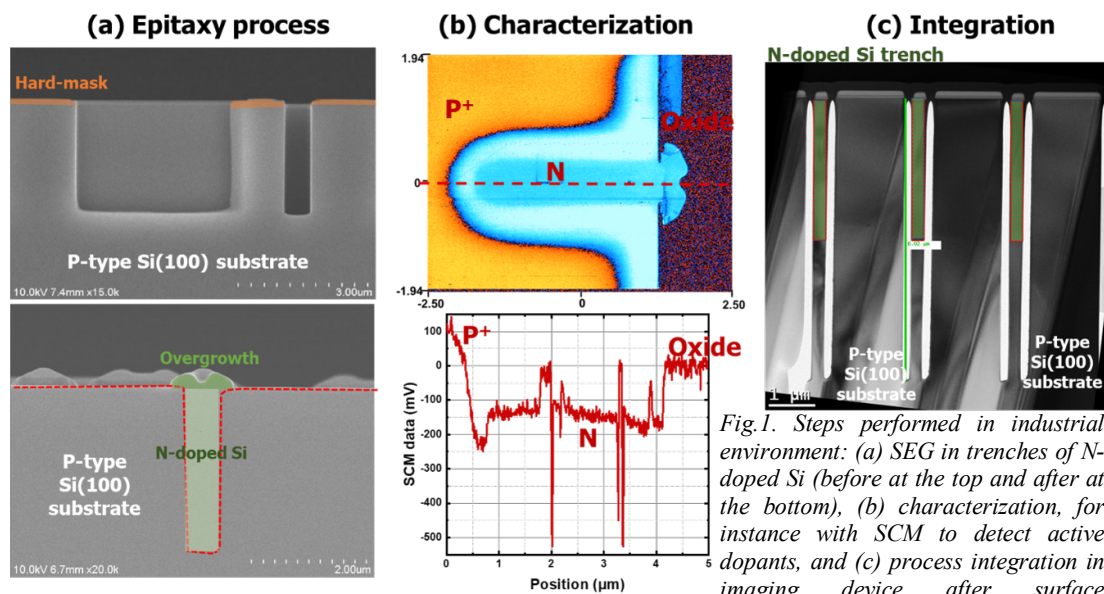


Fig.1. Steps performed in industrial environment: (a) SEG in trenches of N-doped Si (before and after at the top and after at the bottom), (b) characterization, for instance with SCM to detect active dopants, and (c) process integration in imaging device after surface planarization.

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

The proper characterization of boron-doped Si and SiGe monocrystalline and polycrystalline layers is difficult in narrow horizontal cavities. This is the reason why the growth of boron-doped Si and SiGe monocrystalline and polycrystalline layers was conducted on blanket wafers, with a focus on growth kinetics and boron incorporation [2]. X-ray diffraction, resistivity and SIMS measurements were used to assess the active carrier concentration. Raman spectroscopy and ACOM-TEM yielded morphological data such as poly-grains size, distribution of grain boundaries and so on in polycrystalline films. Such films were latter on was used in devices with horizontal cavities and the impact of boron incorporation on electrical performances evaluated.

[1] J. Lespiaux *et al.*, Mater. Sci. Semicond. Proc. **144**, 106549 (2022).[2] J. Lespiaux *et al.*, ECS Trans. 109, 217 (2022).

Lundi 16h20 – 16h40

Epitaxy for the Heterojunction Bipolar Transistors:

Possible ways of improvement

Fabien Deprat^{1*}, Alice Ferrandon¹, Alexis Gauthier¹, Edoardo Brezza¹, Jérémy Vives¹

¹ STMicroelectronics, 38920, Crolles, France

* fabien.deprat@st.com

State-of-the art Silicon-Germanium (SiGe) heterojunction bipolar transistors (HBTs) integrated along complementary Metal-Oxide-Semiconductor transistors (CMOS), also called BiCMOS, are efficient enough for the current telecommunication technology (i.e., 5G). Future generations of wireless telecommunication devices will use the so-called D-Band (from 110 GHz to 170 GHz) (1). To work at this frequency with lower energy consumption, bipolar devices must be greatly improved in terms of integration and materials. This is also true for other applications such as optical communications at 400 GB.s-1, imaging technology in the medical field or radar to support autonomous vehicles.

Reduced Pressure-Chemical Vapor Deposition (RP-CVD) below 600 °C can be useful to improve the emitter resistance. The non-selective emitter deposition generate a fully monocrystalline emitter thanks to a combination of amorphous deposition of Si:As on dielectrics and solid phase epitaxial regrowth (SPER) (Figure 1, from (2)). This technique has already been used in heterojunction bipolar transistors for the non-selective base deposition (3). Doing so, the transition frequency (f_T) increased.

Figure 1. Schematics of the non-selective deposition of Si:As to fabricate the emitters of bipolar transistors. The combination of amorphous deposition (light blue) on dielectrics (orange) and SPER generates a fully monocrystalline film. Extracted from (2)



Figure 1. Schematics of the non-selective deposition of Si:As to fabricate the emitters of bipolar transistors. The combination of amorphous deposition (light blue) on dielectrics (orange) and SPER generates a fully monocrystalline film. Extracted from (2)

Two more elements will be discussed during the presentation. The first element is the facets during the RP-CVD Si epitaxy of the collector. The facets generate a current leakage which must be suppressed or at least minimized. Several process parameters (such as pressure or gas flux) have been tested to reduce the facets. The last element is linked to the manufacturing flow. After selective epitaxy, chlorine-based molecules (also called condensation defects (4)) appear on the wafer and slowly etch the Si (or SiGe) underneath. Therefore, a WET clean is mandatory after the epitaxy, with a time constraint in between, to ensure the specificity of our devices. The origin of these defects will be presented as well as potential solutions to get rid of them.

(1) H. Tataria *et al.*, Proceedings of the IEEE, 109, 7 (2021)

(2) F. Deprat, *et al.* ECS Transactions 109, 4 (2022)

(3) H. Rücker and B. Heinemann, Semiconductor Science and Technology, 33 (2018)

(4) R. van Roijen *et al.*, IEEE/SEMI Advanced Semiconductor Manufacturing Conference (2011)

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

Lundi 16h40 – 17h

L'intégration de semiconducteurs III-V sur silicium par collage et recroissance pour les télécommunications optiques à haut débit

C. Besançon^{1*}, D. Néel¹, G. Cerulo¹, D. Make¹, N. Vaissiere¹, F. Pommereau¹, F. Fournel² and J. Decobert¹

¹ III-V Lab, a joint lab of Nokia Bell Labs, Thales Research and Technology and CEA LETI, 91120 Palaiseau, France

² Univ. Grenoble Alpes, CEA LETI, 38000 Grenoble, France

* claire.besancon@3-5lab.fr

L'explosion du trafic de données numériques impose aux systèmes de communication actuels d'augmenter les débits de transmission tout en réduisant les coûts de production et consommation [1]. L'intégration III-V sur Silicium (Si) fait l'objet d'une "quête" continue et intensive depuis plus de trente ans tant le gain potentiel est immense pour bénéficier des propriétés optiques des III-V associés aux modes de fabrication, consommation et fonctions optiques passives offertes par le Si [2].

Pour autant, cette intégration n'est pas chose aisée du fait des incompatibilités intrinsèques entre ces familles de matériaux : désaccord paramétrique, différences de coefficients d'expansion thermique et différences de polarité. L'intégration hétérogène par collage de matériau III-V sur Si apparaît comme une stratégie efficace pour contourner les difficultés complexes et parfois quasi insurmontables liées à la croissance directe (hétéroépitaxie) de matériaux III-V sur Si [3]–[5]. Plus récemment, une nouvelle plateforme d'intégration par collage d'un film de phosphore d'indium (InP) suivi de la recroissance de matériaux III-V a émergé pour repousser les limitations des modes d'intégration actuels [6]–[8]. En supprimant totalement la problématique du désaccord de maille et de polarité entre III-V et Si, elle permet de combiner le savoir-faire de multi-recroissance issu de la filière III-V sur InP historique à une plateforme avancée de photonique sur Si. Durant ma présentation, je vous expliquerai en quoi cette plateforme d'intégration III-V sur Si a permis de surmonter les limites des modes d'intégration historiques, ceci ayant permis d'obtenir des résultats majeurs et offrant de grandes perspectives.

[1] “Cisco Global Cloud Index: Forecast and Methodology - 2018–2023 White Paper,” 2020.

[2] Y. Shi *et al.*, “Silicon photonics for high-capacity data communications,” *Photonics Res.*, vol. 10, no. 9, p. A106, Sep. 2022, doi: 10.1364/prj.456772.

[3] J. M. Ramirez *et al.*, “III-V-on-Silicon Integration: From Hybrid Devices to Heterogeneous Photonic Integrated Circuits,” *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, vol. 26, no. 2, pp. 1–13, 2019, doi: 10.1109/JSTQE.2019.2939503.

[4] K. Feng *et al.*, “Quantum Dot Lasers Directly Grown on 300 mm Si Wafers: Planar and In-Pocket,” *Photonics*, vol. 10, no. 5, p. 534, May 2023, doi: 10.3390/photonics10050534.

[5] B. Shi and J. Klamkin, “Defect engineering for high quality InP epitaxially grown on on-axis (001) Si,” *J. Appl. Phys.*, vol. 127, no. 3, Jan. 2020, doi: 10.1063/1.5127030.

[6] K. Takeda, S. Matsuo, T. Fujii, K. Hasebe, T. Sato, and T. Kakitsuka, “Epitaxial growth of InP to bury directly bonded thin active layer on SiO₂/Si substrate for fabricating distributed feedback lasers on silicon,” *IET Optoelectron.*, vol. 9, no. 4, pp. 151–157, 2015, doi: 10.1049/iet-opt.2014.0138.

[7] Y. Hu *et al.*, “III/V-on-Si MQW lasers by using a novel photonic integration method of regrowth on a bonding template,” *Light Sci. Appl.*, vol. 8, no. 1, pp. 1–9, 2019, doi: 10.1038/s41377-019-0202-6.

[8] C. Besançon *et al.*, “Comparison of AlGaInAs-Based Laser Behavior Grown on Hybrid InP-SiO₂/Si and InP Substrates,” *IEEE Photonics Technol. Lett.*, vol. 32, no. 8, pp. 469–472, Apr. 2020, doi: 10.1109/LPT.2020.2979254.

Lundi 17h-18h

PRÉSENTATION FLASH DES POSTERS



Mardi 9h – 11h20

Axe 2 : Épitaxie sous fortes interactions

Yvon CORDIER, Ulrike LÜDERS, Jean-Baptiste RODRIGUEZ, Guillaume SAINT-GIRONS

Mardi 9h-9h30

Phases of epitaxial ferroelectric ZrO₂ thin films

Ali El Boutaybi¹, Alban Degezelle¹, Rebecca Cervasio², Thomas Maroutian^{1*}, Sylvia Matzen¹, Ludovic Largeau¹, Jean-Blaise Brubach², Marine Verseils², Pascale Roy², Guillaume Agnus¹, Laurent Vivien¹, Panos Karamanis³, Michel Rérat³, Philippe Lecoeur¹
¹ C2N, Université Paris-Saclay, CNRS, Palaiseau, France
² Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Gif-sur-Yvette, France
³ IPREM, Université de Pau et des Pays de l'Adour, CNRS, Pau, France
* thomas.maroutian@c2n.upsaclay.fr

Doped Hafnia (HfO₂) and Zirconia (ZrO₂) compounds attracted interest for their ferroelectric properties in ultrathin film form (< 10 nm), coupled to their silicon compatibility. In polycrystalline films, obtained by low temperature atomic layer deposition followed by rapid thermal annealing, the ferroelectric behavior is usually attributed to the presence of the orthorhombic Pbc2₁ phase (*o* phase). In epitaxial films, a rhombohedral R3m phase (*r* phase) was proposed to account for the compressive in plane strain-induced distortion of the rhombohedral angle [1]. Based on surface energy considerations supported by *ab initio* calculations, I will show that the ferroelectric *r* phase in pure ZrO₂ is expected to be more stable than in Hf_{0.5}Zr_{0.5}O₂ and pure HfO₂. Indeed, experimentally, for a thickness up to about 40 nm we were able to obtain a single (111)-oriented *r* phase in ZrO₂ films grown by pulsed laser deposition (PLD) on La_{2/3}Sr_{1/3}MnO₃-buffered DyScO₃(110) substrate [2]. Changing the latter, I will discuss how ZrO₂ grown on SrTiO₃(110) (figure below) can be identified as having the tetragonal P4₂/nmc phase (*t* phase), with the help of infrared (IR) absorption spectroscopy data. Given that these films also exhibit a thickness-dependent ferroelectric signature, while the bulk *t* phase is paraelectric, it puts forward the importance to consider surface and interface effects on the stability of the different phases. Finally, coming back to the *o* phase, I will briefly present its attractive properties in terms of electro-optic coefficients [3].

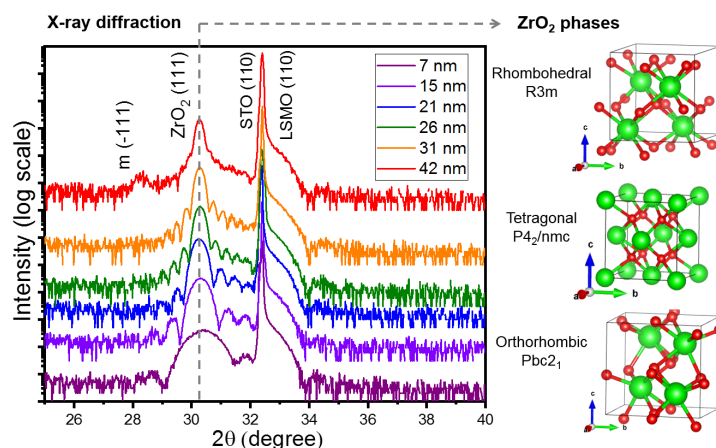


Figure: (Left) X-ray diffraction q -2 q scans of ZrO₂ thin films of different thicknesses grown by PLD on LSMO-buffered STO(110) substrates. (Right) Unit cells of ferroelectric R3m and Pbc2₁ phases and paraelectric P4₂/nmc phase of ZrO₂ (VESTA software, Zr atoms in green, O atoms in red).

[1] [Y. Wei et al., Nature Materials \(2018\)](#).

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

[2] [A. El Boutaybi et al., Phys. Rev. Materials \(2022\).](#)

[3] [A. El Boutaybi et al., Phys. Rev. B \(2023\).](#)

Mardi 9h30-10h

Défauts structuraux dans les couches de semi-conducteurs épitaxiées avec un fort désaccord paramétrique avec le substrat

Gilles Patriarche

Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies (C2N)

Université Paris-Saclay, CNRS

Palaiseau

L'épitaxie de couches de matériaux semi-conducteurs sur un substrat très désaccordé en paramètre de maille s'accompagne de la formation de nombreux défauts structuraux à l'interface et dans l'épaisseur de la couche épitaxiée. La formation du réseau de dislocations d'interface nécessaire à l'accommodation du désaccord paramétrique génère de nombreuses dislocations résiduelles dans l'épaisseur de la couche épitaxiée et de fautes d'empilement liées à la génération de dislocations partielles. Dans le cas de la croissance de semiconducteur III-V sur substrat silicium (100), on observe en plus la formation de domaine d'inversion avec des parois entre les domaines. De nombreuses stratégies ont été essayé afin d'éliminer, ou à tout le moins limiter, la densité de ces défauts dans l'épaisseur des couches. En effet, tous ces défauts structuraux, en particulier les dislocations « traversantes », sont très néfastes pour les propriétés opto-électroniques de ces matériaux. Les solutions les plus classiques consistent à réaliser des recuits et d'insérer des couches contraintes, après la relaxation plastique de la couche épitaxiée, afin de favoriser l'élimination des défauts. D'autres stratégies plus complexes ont été déployées au laboratoire, où dans les équipes partenaires, pour contrôler la formation ou la propagation de ces défauts en structurant le substrat : contrôle de la vicinalité des substrats de silicium afin d'éliminer/contrôler la formation de parois d'antiphase, utilisation de substrat compliant pour limiter la formation de dislocations dans la couche épitaxiée, structuration de la surface du substrat pour utiliser les propriétés des domaines d'inversion (fabrication d'oscillateur paramétrique).

Mardi 10h-10h20

PtSe₂ films grown by molecular beam epitaxy for high frequency optoelectronics

E. Desgué, I. Verschuere, D. Jussey, D. Pommier, E. Grimaldi, D. Carisetti, P. Legagneux, THALES R&T, Palaiseau, France

L. Largeau, J. Chaste, A. Ouergui, C2N, Palaiseau, France

D. Dosenovic and H. Okuno, CEA – MEM, Grenoble, France

I. Florea, D. Pribat, LPICM, Ecole Polytechnique, Palaiseau, France

A. Veccholia, UMPHY CNRS-Thales -Univ. Paris Saclay, Palaiseau, France

eva.desgue@thalesgroup.com pierre.legagneux@thalesgroup.com

PtSe₂ is a 2D material with high intrinsic qualities suitable for high frequency IR optoelectronics [1], exhibiting a bandgap varying from 1.2eV (monolayer) to 0.2eV (bilayer) and becoming semi-metallic for few layers and in bulk form [2]. We investigated the synthesis of PtSe₂ thin (1 to 8 nm) films on sapphire substrates by molecular beam epitaxy. In particular, we studied the impact of a post-growth annealing for various Se fluxes on the full width at half maximum (FWHM) of the PtSe₂ Eg Raman peak (Fig. 1): thinner is the Eg peak width, higher is the crystalline quality [3] which is essential for high (opto)electronic performances. PtSe₂ was also grown on vicinal sapphire (0001) surfaces and we demonstrated a large improvement of film crystallinity using grazing incidence X-ray diffraction (GIXRD) and transmission electron microscopy (TEM) techniques. Conductivity and carrier mobility measured by Van der Pauw experiments on 20x20 mm samples are also improved.

We synthesized a 7.5nm-thick PtSe₂ film on a 2 inches sapphire substrate and fabricated coplanar waveguides integrating a 4x4 μm PtSe₂ channel. The channel was illuminated with a 1.55μm laser beam modulated in intensity at frequencies varying between 2 and 67 GHz. Our PtSe₂ photodetector exhibits a record 3dB bandwidth of 60GHz (Fig. 2). Moreover, we demonstrated a 30GHz bandwidth optoelectronic mixer, with



performances comparable to those obtained with graphene [4]. These results confirm that PtSe₂ is a highly promising material for high frequency optoelectronics.

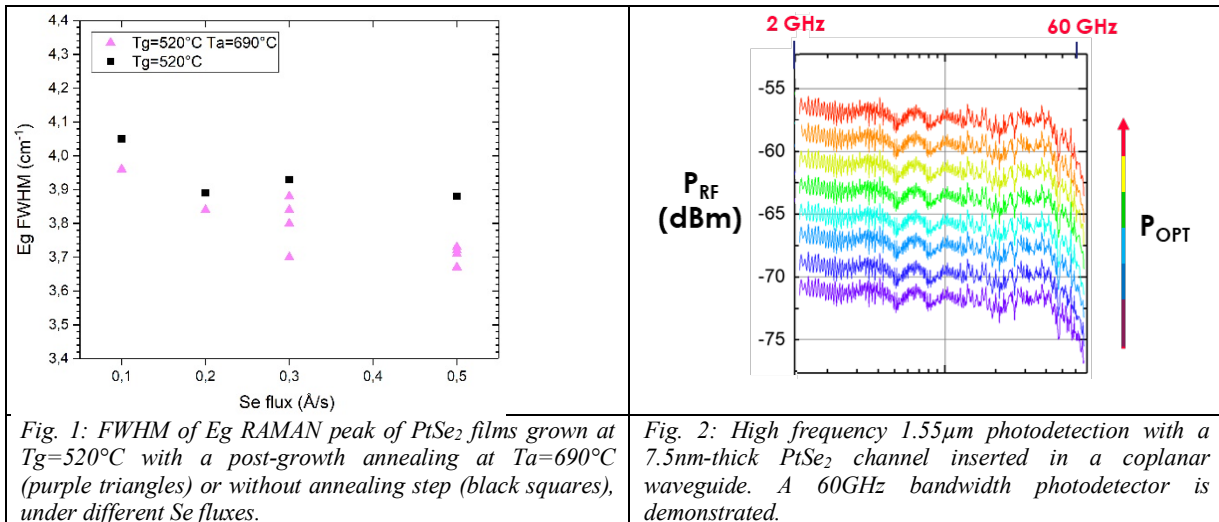


Fig. 1: FWHM of Eg RAMAN peak of PtSe₂ films grown at T_g=520°C with a post-growth annealing at T_a=690°C (purple triangles) or without annealing step (black squares), under different Se fluxes.

Fig. 2: High frequency 1.55µm photodetection with a 7.5nm-thick PtSe₂ channel inserted in a coplanar waveguide. A 60GHz bandwidth photodetector is demonstrated.

[1] Y. Wang et al., Appl. Phys. Lett., 116 (2020), 211101
 [2] Y. Wang et al., Nano Lett. 15 (2015), 4013.
 [3] S. Lukas et al., Adv. Funct. Mater., 31 (2021), 2102929
 [4] L. Hamidouche et al., ACS Photonics, 8 (2021), 369

Mardi 10h20-10h40

Croissance épitaxiale par ablation laser pulsé de films minces de Ln₂Ti₂O₇ (Ln=lanthanides)

A. Bayart¹, M. Huvé², P. Roussel², J. F. Blach¹, R. Desfeux¹, S. Saitzek^{1,*}

¹ Univ. Artois, CNRS, Centrale Lille, Univ. Lille, UMR 8181, Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS), F-62300 Lens, France

² Univ. Lille, CNRS, Centrale Lille, Univ. Artois, UMR 8181, Unité de Catalyse et Chimie du Solide (UCCS), F-59000 Lille, France

* sebastien.saitzek@univ-artois.fr

La famille des oxydes Ln₂Ti₂O₇ (avec Ln=Lanthanide) présente aujourd’hui une forte attractivité dans la communauté scientifique du fait de leur fort potentiel multifonctionnel (propriétés catalytiques, optiques et piézo-/ferroélectriques). Ainsi, ces oxydes sont utilisés pour la dégradation de polluants de type COV en photocatalyse [1]. En optique, ils peuvent être employés comme matrice d’insertion pour des terres rares et permettre ainsi l’élaboration de nouveaux luminophores [2]. Dans leur structure monoclinique, ces matériaux présentent également des propriétés piézo-/ferro-électriques, avec une température de Curie significativement élevée (T_c~1500°C). Cette caractéristique permet d’envisager des utilisations en milieux extrêmes telles que la réalisation de systèmes Micro-/Nano-électromécaniques (M/NEMs) ou d’injecteurs piézoélectriques pour l’industrie automobile ou aérospatiale (fonctionnement à très hautes températures) [3].

Dans ce travail, nous présenterons la synthèse de films minces Ln₂Ti₂O₇ par la technique d’ablation laser pulsé en s’intéressant à la limite de stabilité des structures pérovskites en feuillets et/ou pyrochlores en fonction de la nature du substrat ((100)-SrTiO₃ et (110)-SrTiO₃) et des rayons ioniques Ln³⁺ [4,5]. Nous montrerons la possibilité de synthétiser de nouvelles phases métastables Ln₂Ti₂O₇ (avec Ln=Sm, Gd, Eu) présentant des structures pérovskites en feuillets. Les résultats des caractérisations structurales réalisées par Diffraction de Rayons X Haute-Résolution (cartographies de l’espace réciproque, des figures de pôles ou ϕ -scan) et par Microscopie Electronique à Transmission seront présentés et discutés afin d’établir les relations d’épitaxie. La croissance particulière selon un plan (012) tilté de la structure pérovskite en feuillet présentant un maillage sur (100)-SrTiO₃ sera détaillé.

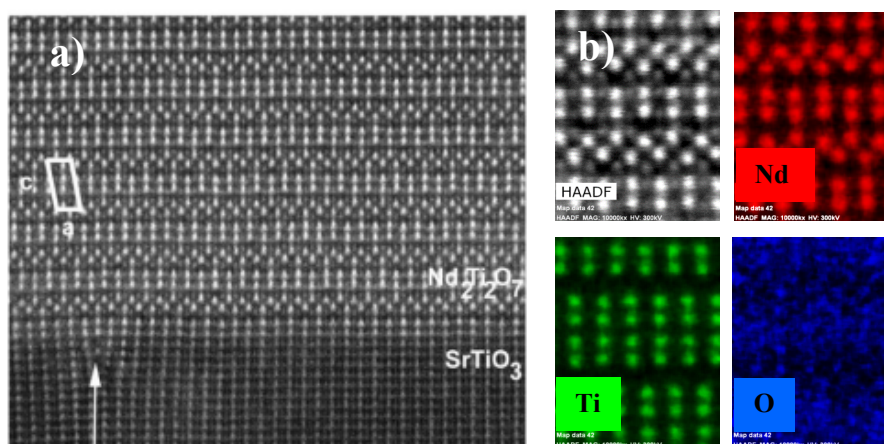


Figure 1. a) Image HR-TEM de l'interface $\text{Nd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7/(110)\text{-SrTiO}_3$ et b) Image HAADF et images EDS en couleur simulée.

[1] S. Leroy et al., *Journal of Photochemistry and Photobiology A*, 2020, 401 112767; [2] F. Szczepanski et al., *Journal of Alloys and Compounds*, 2020, 826, 154157; [3] A. Sayir et al., *Ceramic Transactions*, 2006, 179, 57-68; [4] S. Saitzek et al., *Journal of Materials Chemistry C*, 2014, 2 (20), 4037 – 4043; [5] A. Bayart et al., *CrystEngComm*, 2013, 15, 4341-4350.

Mardi 10h40-11h

Distribution initiale de phase et enfouissement des domaines d'antiphase lors de la croissance de III-Vs sur Si(001).

A. Gilbert¹, M. Rio Calvo¹, M. Ramonda², L. Cerutti¹, C. Cornet³, G. Patriarche⁴, A. Trampert⁵, E. Tournié¹, J.-B. Rodriguez^{1*}

¹ IES, Université de Montpellier, CNRS, F- 34000, France

² CTM-UM, Université de Montpellier, F- 34000, France

³ Univ Rennes, INSA Rennes, CNRS, Institut FOTON – UMR 6082, F-35000, France

⁴ C2N, Université Paris Saclay, CNRS, UMR 9001, France

⁵ Paul-Drude-Institut für Festkörperphysik, Hausvogteiplatz 5-7, 10117 Berlin, Allemagne

* jean-baptiste.rodriguez@cnrs.fr

L'intégration monolithique de lasers III-V sur substrats silicium (Si) offre une solution inédite pour combiner les performances des sources lumineuses avec la maturité technologique et les faibles coûts de production de l'industrie silicium. Cette approche ouvre de vastes horizons pour les dispositifs photoniques de haute performance, avec des applications allant des communications optiques à grande vitesse aux capteurs chimiques et biologiques [1]. Malheureusement, les dispositifs intégrés par épitaxie souffrent d'un manque de fiabilité à cause de la forte densité de défauts cristallins générés pendant la croissance. Un défaut en particulier, les parois d'antiphase (APBs), forme des chemins électriquement chargés court-circuitant les composants. Lors de l'hétéroépitaxie d'un III-V polaire sur un substrat non-polaire (Si ou Ge), deux phases -ou domaines- nucléent simultanément à la surface du Si et leur coalescence donne lieu à ces APBs.

Récemment, un modèle théorique a été proposée par Cornet et al [2] pour expliquer les mécanismes de formation et d'enfouissement des APDs. Selon ce modèle, les deux phases sont peuplées de marches de compositions différentes : un domaine possède des marches de type III et le second des marches de type V. Les éléments III s'incorporant préférentiellement sur un des deux types de marches, un domaine (le domaine principal (MPD)) croît plus vite, au détriment du domaine enfoui (le domaine d'antiphase (APD)). Dans ce processus, la direction de l'angle de désorientation résiduel ($<0.5^\circ$) du substrat et le maintien d'une croissance par avancée de marches tiennent un rôle capital. Nous avons expérimentalement démontré la validité de ce modèle pour la croissance à haute température de GaSb sur substrats de silicium (001) à faible angle de désorientation [3].

Afin d'étendre la validité de ce modèle aux autres matériaux III-V, nous avons ensuite étudié la croissance basse température de couches de GaAs sur substrats Si. Cette fois, le faible angle de désorientation du Si est à l'origine de l'organisation du III-V en bandes périodiques alternant domaines principal et domaines d'antiphase. Cette configuration en bandes parallèles conduit à l'enfouissement des APDs dans des couches

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

d'épaisseur inférieures à 150 nm, même sans avancée de marches. Le mécanisme à l'origine de la formation et de la propagation des APBs dans ces couches de GaAs sera détaillé lors de la présentation. En nous appuyant sur nos travaux précédents, nous montrerons l'influence de la distribution initiale de phase sur le contrôle des domaines et généraliserons nos résultats afin de proposer un modèle universel qui permettra d'établir les conditions optimales de croissance pour tous les matériaux III-Vs sur substrats Si.

Ces travaux ont été financés par le PIA (Equipex EXTRA, ANR11-EQPX-0016), le projet FILTER ANR- DFG (ANR-20-CE92-0045), le projet ANR PIANIST (ANR-21-CE09-0020), le projet NUAGES (ANR-21-CE24-0006) et le réseau français Renatech.

[1] R. Soref, « Mid-infrared photonics in silicon and germanium », Nature Photon, vol. 4, no 8, Art. no 8, août 2010, doi: 10.1038/nphoton.2010.171.

[2] C. Cornet et al., « Zinc-blende group III-V/group IV epitaxy: Importance of the miscut », Phys. Rev. Materials, vol. 4, no 5, p. 053401, mai 2020, doi: 10.1103/PhysRevMaterials.4.053401.

[3] M. Rio Calvo et al., « Crystal Phase Control during Epitaxial Hybridization of III-V Semiconductors with Silicon », Advanced Electronic Materials, vol. 8, no 1, p. 2100777, oct. 2021, doi: 10.1002/aelm.202100777.

Mardi 11h-11h20

Effet de la polarité du substrat 4H-SiC sur la croissance hétéroépitaxiale du carbure de bore BxC par CVD

G. Ferro^{1*}, L. Auvray¹, F. Cauwet¹, Y. Benamra¹

¹ Laboratoire des Multimatériaux et Interfaces, UMR CNRS 5615, 6 rue Victor Grignard, Université Claude Bernard Lyon 1, 69622 Villeurbanne

* gabriel.ferro@univ-lyon1.fr

Le carbure de bore (BxC) est un semi-conducteur peu connu, conséquence probable des difficultés rencontrées pour l'élaboration de monocristaux, massifs ou en couches minces. D'après la faible littérature sur le sujet [1-3], la croissance hétéroépitaxiale sur substrat 4H-SiC semble possible sans être cependant aisée. Nous avons donc étudié la croissance à haute température (1600°C) de BxC par CVD sur 4H-SiC, 4°off en utilisant les précurseurs C3H8 et BCl3. Pour chaque expérience, deux wafers de 4HSiC de polarité différente (face Si et face C) ont été utilisés. Le rapport C/B dans la phase gazeuse a varié de 0,5 à 24. En utilisant une procédure simple (chauffage sous 16 slm H2 jusqu'à 1600°C, et introduction des réactifs après 5 minutes d'attaque à cette température), on obtient les morphologies montrées en Fig. 1. La composition de la phase gazeuse riche en B conduit à des îlots isolés pour les deux polarités (Fig. 1a,f) alors qu'une couche entièrement couvrante est toujours obtenue en augmentant ce rapport. Des surfaces très rugueuses et désordonnées sont systématiquement trouvées pour le dépôt sur polarité Si. Des résultats très similaires sont obtenus sur la face C sauf pour la couche élaborée avec C/B=12 (Fig. 1d) pour laquelle une microstructure orientée et dentelée est observée, suggérant une couche fortement orientée.

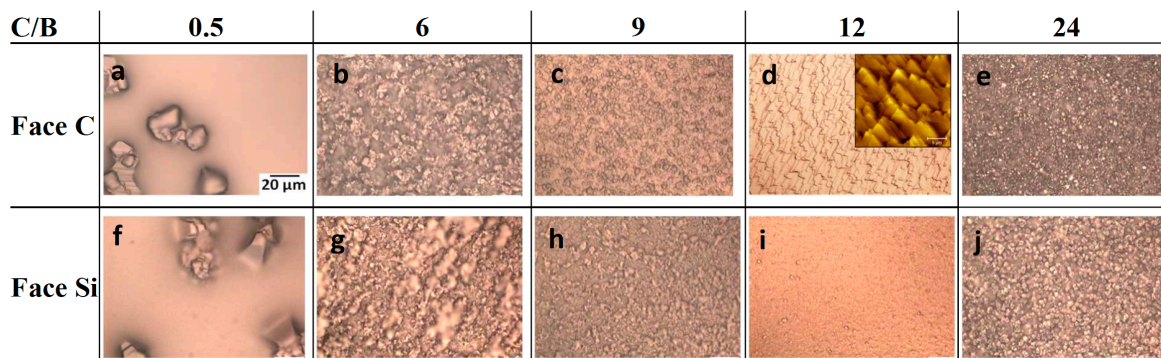


Fig. 1. Morphologie de surface des couches de BxC déposées à différents rapports C/B, sur les faces Si et C du substrat 4H-SiC. L'encadré en d) correspond à un scan AFM de 25x25 µm² du même échantillon.

Les analyses DRX confirment le caractère fortement orienté de la couche de BxC à C/B=12 sur polarité C du substrat, avec la seule orientation [0003] détectée. Cette orientation préférentielle est également obtenue sur toute la gamme $9 \leq C/B \leq 24$ même si des conditions trop riches en C entraînent un co-dépôt de graphite. Sur polarité Si du substrat, les analyses DRX montrent que les couches sont toutes polycristallines. Sur cette polarité, il est nécessaire de modifier la procédure de croissance pour obtenir une couche de BxC orientée [0003]. Ceci est

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

réalisé en intercalant une étape de boruration (traitement sous BCl_3 seul) du substrat à 1200°C pendant 10 min avant la croissance CVD classique à 1600°C . Les analyses TEM montrent que cette boruration permet de créer une fine couche de BxC en épitaxie avec le substrat. Ceci n'est visiblement pas nécessaire sur polarité C du substrat.

[1] L. Souqui et al, Dalton Trans., 51 (2022) 15974-15982

[2] W. Norimatsu et al, Nanotechnology 31 (2020) 145711

[3] Y. Benamra et al, ICSCRM2022 oral presentation, to be published in Mater. Sci. Forum (2023)

Mardi 11h50 – 16h

Axe 3 : Épitaxie sous faibles interactions (van der Waals)
Mathieu JAMET, Adrien MICHON, Geoffroy PREVOT

Mardi 11h50-12h20

Transmission electron microscopy for the study of epitaxially grown 2D materials

Hanako Okuno

hanako.okuno@cea.fr

Epitaxial growth is a route to achieve highly crystalline continuous 2D layers. In recent years, large scale epitaxial growth of graphene and various transition metal dichalcogenides (TMDs) have been demonstrated by many research groups. However, highly crystalline layer production with expected electrical properties is still challenging due to the weak interaction between substrate and grown layers. For instance, slight mis-alignment and symmetrical crystal inversion in neighboring nucleation sites result in a large amount of atomic defect structures at the stage of coalescence and which drastically degrades materials quality. The presence of polymorphe, such as 2H and 1T⁺ in the TMDs, also modifies their electronic properties. In order to control growth process and to predict intrinsic properties of grown material up to wafer scale as a patchwork of defect structures, multiscale structural analysis should be accessible in routine way. X-ray diffraction (XRD) gives a precise information on material quality regarding the crystallinity and the angular distribution at mm scale, while scanning transmission electron microscopy (STEM) imaging offers today the capability to study the detailed local atomic structures such as vacancies, grain boundaries as well as the associated chemical composition at atomic scale. However, these techniques do not reveal complete material characteristics because of the gap in scale between the information obtained by different techniques. Four dimensional (4D)-STEM is a new acquisition technique allowing to simultaneously record 2D images in real and reciprocal spaces.¹ Multiple information, from structure to electric field,² at different scales can be reconstructed from signals appearing in diffraction pattern acquired at each pixel of the beam scan.

In this work, we first present the capability of STEM techniques to collect multiple information on the structure, chemistry and electric character appearing in 2D epitaxial layers at the atomic scale. Secondly, a new analytical process using 4D-STEM will be demonstrated to study 2D materials epitaxially grown in both laboratory and industrial scales. Orientation, polarity and phase maps in various TMD monolayers are reconstructed at micron scale and directly correlated with both large scale XRD analysis and related atomic defect structures³. In addition, the structural mapping technique was also applied in epitaxial vdW heterostructures for mapping local twist angles. The results show the capacity to construct an overview of synthesized materials from large scale down to atomic scale.

¹C. Ophus, *Microscopy and Microanalysis*, 25 (2019) 563.

²J.A. Hachtel, J. C. Idrobo and M. Chi, *Adv. Struct. Chem. Imag.*, 4 (2018) 10.

³D. Dosenovic et al., *arXiv:2306.05505v1* (2023).

Mardi 12h20-12h50

CVD growth of WSe₂ mono- and bi-layers

F. Oehler^{1*}, G. di Berardino¹, A. Mahmoudi¹, A. Chiout¹, C. Brochard¹, M. Bouaziz¹, J. Chaste¹,
A. Ouerghi¹

¹ Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies

² Université Paris Saclay, CNRS, UMR 9001, France

* fabrice.oehler@c2n.upsaclay.fr

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

Two-dimensional (2D) materials, such as graphene, h-BN, black phosphorus or transition metal dichalcogenides (TMDs) are ideal platforms for studying physical properties which are not attainable in their bulk counterparts. Such layered materials exhibit diverse electronic structures, which can be tuned by controlling their thickness, surface adsorption or strain. The TMDs family (MX_2 , M=metal, X=chalcogen) is of particular interest with many compounds being semiconductors with direct band gap when reduced to single monolayer thickness. With large exciton binding energy and a large spin splitting of the valence band, WSe_2 is good candidate for applications in spintronic, valleytronics, transistors and photo-detectors.

Moving from the mechanical exfoliation to the direct synthesis of 2D material at the wafer scale is currently a major focus of the research community. This is key step to migrate our 2D materials from scientific experiments into actual devices. Such efforts in developing direct synthesis methods also come with additional benefits, such as the growth of few-layer 2D materials that do not exist in the bulk, and hence cannot be obtained by exfoliation.

In this work, we present the growth of mono- and bi-layer WSe_2 obtained by Chemical Vapor Deposition on silica surfaces. The obtained crystal takes the form of monocrystalline flakes, few monolayer thick and a few tens of micron wide. We then identify several WSe_2 structures (mono-layer, bi-layers of different orientations) that we isolate and characterize using Raman spectroscopy, photoluminescence, transmission electron microscopy and angle-resolved photoemission spectroscopy.

Mardi 14h-14h20

Preuve de l'existence de clusters monocouche d'Ag épitaxiés à la surface $\alpha-Al_2O_3(0001)$

R. Lazzari¹, J. Goniakowski¹, G. Cabailh¹, R. Cavallotti¹, J. Jupille¹, N. Trcera², P. Lagarde²

¹CNRS/Sorbonne Université, Institut des NanoSciences de Paris, 4 Place Jussieu, 75005 Paris

²Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Saint-Aubin, BP 48, F-91192 Gif-sur-Yvette
remi.lazzari@insp.jussieu.fr

L'alumine $\alpha-Al_2O_3(0001)$ est la surface d'oxyde, après $TiO_2(110)$, la plus étudiée ou usitée en tant que substrat pour la croissance épitaxiale. En dépit d'un grand nombre de travaux théoriques *ab initio* sur la structure atomique de l'interface des métaux sur $\alpha-Al_2O_3(0001)$, aucune étude expérimentale ne s'est réellement attachée à la question. Cette présentation démontrera, dans ce domaine où la croissance est 3D, l'intérêt d'une combinaison entre absorption X et simulations atomistiques pour déterminer l'environnement local de l'Ag *i.e.* la distance moyenne Ag-Ag (d_{AgAg}), celle Ag-O (d_{AgO}) ainsi que la coordinance moyenne CN (Figure). La variation concomitante de d_{AgAg} et CN met en lumière de façon non-ambiguë la dimensionalité des clusters d'Ag (Figure). Une structure d'interface dépendante de la taille est mise en évidence. De façon surprenante, à faible taux de couverture dans un régime de taille d'une dizaine d'atomes, les atomes d'Ag résident sur les sites Al de la surface pour former des îlots déformés d'une monocouche de haut ayant une distance Ag-Ag (2.75 Å) en accord avec le réseau de l'alumine. A plus grande taille, alors que les particules 3D commencent à apparaître, les atomes d'interface ont tendance à quitter les sites Al pour s'établir sur ceux O alors que la distance d_{AgAg} augmente. La théorie prédit l'existence de clusters 2D de Pd et de Pt sur la même surface et une transition similaire avec la taille. La transformation de clusters 2D à des îlots 3D macroscopiques s'accompagne d'une variation de l'énergie d'adhésion puis de l'introduction de dislocations d'interface. Dans ce contexte, le rôle des contraintes de surface et d'interface (loi de Laplace) dans les îlots d'Ag sur des substrats à désaccords paramétriques différents ($\alpha-Al_2O_3(0001)$, $MgO(001)$ et silice amorphe) sera discuté.

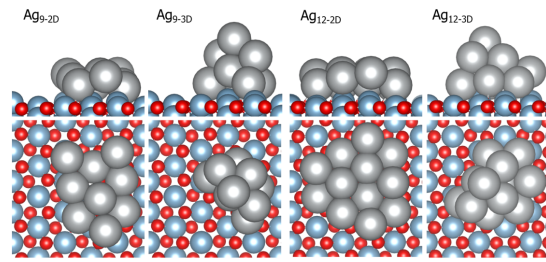
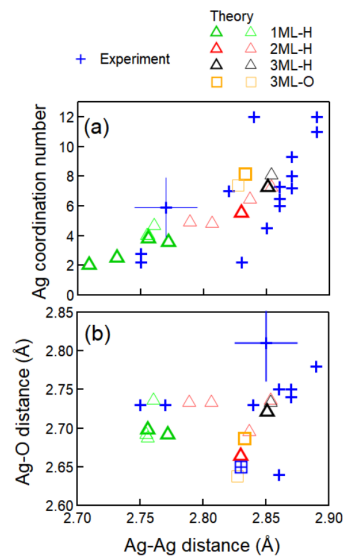


Figure : Comparaison entre distances et coordination moyennes déterminées par EXAFS et simulations ab initio sur des particules d'Ag/ α - $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$. Modèle atomiques correspondants au clusters 2D et 3D à faibles tailles

Mardi 14h20-14h40

Etats hybrides monoplan PtSe_2 - graphène: rôle de l'angle de tilt interfacial

P. Mallet*, F. Ibrahim², M. Chshiev², M. Jamet² and J.Y. Veuille¹

¹ Institut Néel, CNRS and Univ. Grenoble Alpes, Grenoble, France

² IRIG-SpinTec, CEA and Univ. Grenoble Alpes, Grenoble, France

* pierre.mallet@neel.cnrs.fr

Un aspect remarquable des hétérostructures van der Waals est la possibilité de contrôler leur structure électronique par effet de proximité [1]. Cette approche a été par exemple utilisée pour introduire une structure électronique polarisée en spin dans du graphène sur un semiconducteur (SC) 2D, de type dichalcogénure de métaux de transition (TMD), en vue d'application en spintronique [2]. De tels effets de proximité reposent sur l'hybridation entre les états électroniques π du graphène et ceux du matériau 2D TMD-SC, qui dépend en général de l'orientation relative entre les 2 systèmes. Ainsi, l'amplitude de l'effet de proximité doit pouvoir être contrôlée via cette orientation relative interplan [3].

Les travaux présentés ici sont directement reliés à cette thématique : A l'aide d'un microscope à effet tunnel (STM) fonctionnant à 8K sous UHV, nous avons sondé la structure électronique du système hybride monoplan (1L) de PtSe_2 (synthétisé par MBE) sur du biplan de graphène (BLG) épitaxié sur SiC. Le STM permet d'identifier des mini domaines (d'une dizaine de nm), pour lesquels un désordre rotationnel interplan existe (Fig. 1). Celui-ci génère des figures de moirés (MP) dont la période P dépend de l'orientation relative interplan locale. Notons que ces superstructures sont absentes (présentes) lorsque l'on sonde les états électroniques à tension tunnel +1.20V (-0.80V), c'est à dire en dehors (à l'intérieur) du gap de 1L- PtSe_2 . Nous suggérons que les moirés (MP) sondés correspondent à des états hybrides d'interface, identifiés également par nos calculs DFT. Comme le montre la figure 1, l'amplitude des MP (reliée à l'amplitude des états hybrides) dépend de l'angle de rotation à l'interface. Des mesures complémentaires de spectroscopie tunnel montrent que la conductance tunnel sondée dans le gap du TMD-SC est plus élevée pour les MP de plus grande période. En s'appuyant sur des calculs récents établissant le schéma de couplage à l'origine des états hybrides pour une orientation relative Gr/TMD-SC quelconque [4,5], nous confirmons que le STM sonde bien de tels états hybrides à l'interface 1L- PtSe_2 , et nous mettons en évidence une dépendance de l'amplitude de ces états hybrides avec l'orientation relative interplan, en bon accord avec celle obtenue par ces calculs.

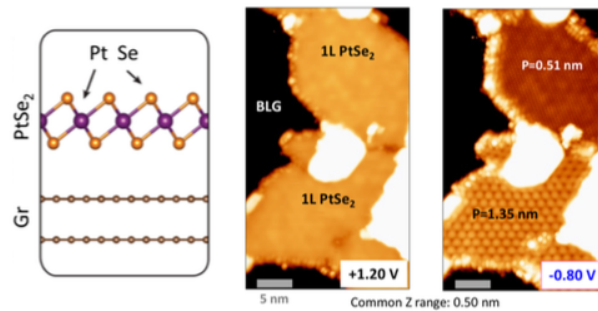


Figure 1: Image STM de superstructures (Moirés) induites par différents angles de rotation à l'interface 1L-PtSe₂/BLG). L'image à -0.8V sonde les états hybrides à l'intérieur du gap du TMD semi-conducteur, dont l'amplitude dépend de l'angle de rotation à l'interface. BLG: biplan de graphène sur SiC.

- [1] I. Zutic, A. Matos-Abiague, B. Scharf, H. Dery, K. Belaschhenko, Mater. Today **22**, 85 (2019).
[2] J. F. Sierra, J. Fabian, R. K. Kawakami, S. Roche, S. O. Valenzuela, Nat. Nanotechnol. **16**, 856 (2021) [3] T. Naimer, K. Zollner, M. Gmitra and J. Fabian, Phys. Rev. B **104**, 195156 (2021)
[4] Y. Li and M. Koshino, Phys. Rev. B **99**, 075438 (2019)
[5] A. David, P. Rakya, A. Kormányos and G. Burkard, Phys. Rev. B **100**, 085412 (2019)

Mardi 14h40-15h

Croissance de graphène par CVD sous hydrogène pour les applications

C. Mastropasqua, A. Lamrani Alaoui, M. Portail, S. Vézian, A. Reserbat-Plantey,

M. Al Khalfioui, M.-T. Dau, Y. Cordier, A. Michon*

Université Côte d'Azur, CNRS-CRHEA, Sophia Antipolis, France

* adrien.michon@crhea.cnrs.fr

La croissance de graphène sur SiC par CVD sous hydrogène, étudiée depuis 2010 [1], consiste simplement à faire croître du graphène à partir de propane dans une atmosphère d'hydrogène et d'argon. La présence d'hydrogène dans la phase gaz favorise un excès de silicium à la surface, rendant ainsi impossible la croissance de graphène sans flux de propane [2], au contraire de ce qui se passe lors d'une croissance de graphène par recuit (sublimation du silicium et formation de graphène à partir d'un excès de carbone à la surface du SiC).

Dans cet exposé, nous montrerons les nombreux effets de la présence d'hydrogène avant, pendant, et après la croissance. Nous discuterons en particulier des mécanismes d'hydrogénation et déshydrogénation de l'interface graphène/SiC, pouvant avoir lieu pendant la phase de croissance et le refroidissement, et susceptibles d'influencer les propriétés électroniques. Nous montrerons aussi qu'un refroidissement sans hydrogène est le plus à même de figer la croissance, ce qui permet d'observer les différents stades de la formation du graphène. Nous montrerons enfin que la CVD sous hydrogène permet de faire croître, sous certaines conditions et sur les bons substrats, une monocouche de graphène uniforme sur 2'' (Figure ci-dessous).

Dans la conclusion, nous donnerons finalement un aperçu des applications du graphène épitaxié par CVD sous hydrogène, notamment pour la métrologie électrique [3] ou comme surface pour l'épitaxie de van der Waals de nitrures [4] ou de matériaux 2D [5].

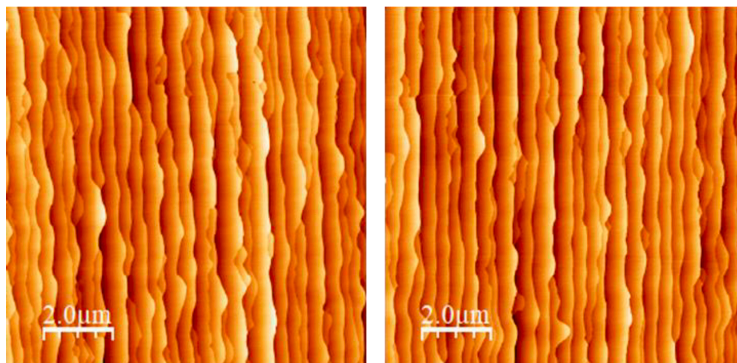


Figure : Images AFM obtenues au centre et sur la périphérie d'un substrat de SiC 2''.

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

Remerciements : ce travail a été financé en partie par les projets européens GIQS et ETMOS, par le projet ANR VanaSiC, le projet du PEPR Électronique ADICT et par la Région Sud.

- [1] A. Michon et al., Appl. Phys. Lett. 97, 171909 (2010)
- [2] R. Dagher et al., Cryst. Eng. Comm. 20, 3702 (2018)
- [3] R. Ribeiro-Palau et al., Nature Nanotech. 10, 965 (2015)
- [4] C. Paillet et al., Nanotechnology 31, 405601 (2020)
- [5] Z. Ben Jabra et al., ACS Nano, 2022.

Mardi 15h-15h20

Mécanismes de croissance des couches épitaxiales de Xènes révélés par microscopie à effet tunnel in-situ en temps réel

L. Florean, K. Zhang, A. Curcella, R. Bernard, Y. Borensztein, H. Cruguel, G. Prévot*

¹ Sorbonne Université, CNRS, Institut des NanoSciences de Paris, 75005 Paris, France

*prevot@insp.jussieu.fr

Les Xènes 2D (où X = Si, Ge ...) sont une classe de matériaux bidimensionnels du groupe IVA qui possèdent des propriétés électroniques différentes de celles des matériaux 3D correspondants. Par exemple, le silicène (germanène), qui correspond à un plan hexagonal ondulé de Si (Ge), a une structure électronique similaire à celle du graphène. Cependant, ils ne peuvent pas être obtenus par exfoliation et doivent être synthétisés sur un substrat. La croissance du silicène et du germanène a été revendiquée sur divers substrats métalliques, tels que Ag, Au, Pt, Al, mais nombre des résultats rapportés sont controversés car l'implication du substrat pendant la croissance n'est pas connue et la formation d'alliage est suspectée.

Nous avons développé une série d'outils pour suivre en temps réel par microscopie à effet tunnel (STM) la croissance épitaxiale des monocouches de Xènes. Pour tous les systèmes étudiés (Si/Ag, Si/Al, Si/Au, Ge/Ag, Ge/Al), nous avons observé que les atomes IVA interagissent fortement avec le substrat, en contradiction avec les diagrammes de phase correspondants montrant, dans tous les cas, une solubilité mutuelle négligeable dans la gamme de température étudiée. En fonction du couple IVA/substrat, nous avons observé soit la croissance de domaines Xènes insérés dans les terrasses du substrat, soit la formation d'alliages de surface, soit la formation d'alliages en volume. L'analyse des déplacements atomiques et l'évolution de la densité des domaines en fonction de la température nous permettent d'extraire les barrières cinétiques associées aux processus élémentaires de la croissance.

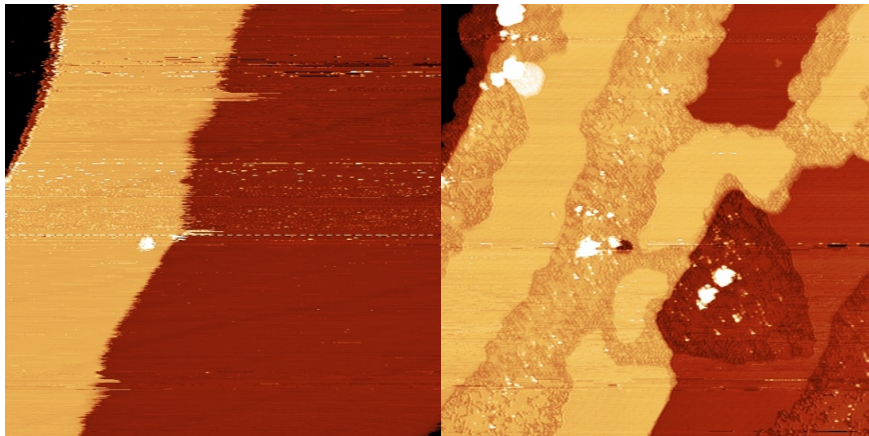


Figure : Croissance de Si/Ag(111) à 480 K. Même zone scannée avant et après dépôt de $\sim 0,5$ ML de Si. Les domaines de silicène sont insérés dans la surface, et les atomes d'Ag éjectés forment de nouvelles terrasses. Taille des images : 225x225 nm².

- [1] G. Prévot, R. Bernard, H. Cruguel, Y. Borensztein, Appl. Phys. Lett. 105 (2014) 213106
- [2] R. Bernard, Y. Borensztein, H. Cruguel, M. Lazzeri, and G. Prévot, Phys. Rev. B 92 (2015) 045415
- [3] G. Prévot, C. Hogan, T. Leoni, R. Bernard, E. Moyen, L. Masson, Phys. Rev. Lett. 117 (2016) 276102
- [4] A. Curcella, R. Bernard, Y. Borensztein, M. Lazzeri, G. Prévot, Nanoscale 10 (2018) 2291, K. Zhang, R. Bernard, Y. Borensztein, H. Cruguel, G. Prévot, Phys. Rev. B 102 (2020) 125418.

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

Mardi 15h20-15h40

Quasi Van der Waals epitaxy of cadmium telluride on 2D materials

E. Tourard*¹, P. Brunet², H. Boukari ², P. Ballet ¹, B. Hyot ¹, P. Pochet ³

¹ Univ. Grenoble Alpes, Cea, Leti, F-38000 Grenoble, France - Grenoble (France)

² Université Grenoble Alpes, CNRS, Institut Neel, 38000 Grenoble, France - Grenoble (France)

³ Department of Physics, IriG, Univ. Grenoble-Alpes And CEA, Grenoble F-38054, France - Grenoble (France)

* enguerrand.tourard@cea.fr

Cadmium telluride is a key material for many technologies, such as energy production or infrared sensing, which makes the growth of free standing (strain free) layers of CdTe of particular interest. In 2017, Kim *et al* demonstrated that it is possible to guide the growth of a material through one or few monolayers of 2D material, given that the polarity of the substrate below the 2D material is strong enough. This technique, called “*remote epitaxy*”, has been applied successfully to a wide range of III-V / 2D systems, such as the epitaxial growth of GaN on hBN / GaN substrate, or GaAs on Graphene / GaAs substrate. Epitaxially grown layers are then easily transferred and the 2D coated substrate can be re-used for future growths. Despite this great success with III-V materials, *remote epitaxy* of II-VI semiconductors hasn't been studied much. From a purely theoretical point of view, CdTe with its higher ionicity than GaAs or GaN should be a good candidate for *remote epitaxy*. However, a transfer step is required to obtain 2D coated substrates, with its lot of difficulties (polymeric contamination, degradation of the 2D surface, oxidation of the substrate...), whereas high quality surface and interface are required to perform *remote epitaxy*.

Another approach to bypass the need of 2D material transfer would be to perform epitaxy on a reconstructed passivated surface. It has been proven recently (Jovanovic *et al*, 2020) that sapphire could act as a quasi van der Waals substrate for such a growth of CdTe via the in-situ formation of a monolayer of tellurium at the interface. In such a case, the substrate surface, free from dangling bonds, allows for an easy transfer of the epitaxially grown CdTe membrane. But, unlike with “*remote epitaxy*”, growth is not seeded by the polar substrate, and one can ask what is the impact on the crystalline quality of the epilayer?

In this communication, we will present the results of MBE grown CdTe film on both sapphire and graphene wet-transferred onto CdZnTe. The crystalline quality of the grown CdTe film is discussed based on SEM, AFM and X-ray diffraction. Graphene quality is checked out prior and after epitaxy based upon Raman spectroscopy. Additional XPS analysis were performed to evaluate substrate oxidation and graphene cleanliness. Results of CdTe layer removal and manipulation will also be presented.

Mardi 15h40-16h

Growth of (Al, Ga)N Quantum Dots on h-BN and Exfoliation Processes towards the Fabrication of Flexible Efficient UV-C LEDs

A. Zaiter^{1,*}, A. Reserbat-Plantey¹, N. Nikitskiy¹, M. Nemoz¹, P. Vuong², V. Ottapilakkal², S. Sundaram², G. Cassabois³, B. Gil³, A. Ougazzaden^{2,4}, J. Brault¹

¹ CNRS-CRHEA, Université Côte d'Azur, Valbonne, 06560, France

² IRL 2958 Georgia Tech – CNRS, Georgia Tech Europe, Metz, 57070, France

³ UMR 5221, Laboratoire Charles Coulomb and Université Montpellier 2, Montpellier, 34095, France

⁴ School of Electrical & Computer Engineering, Georgia Institute of Technology, Atlanta, GA 30332, USA

* aly.zaiter@crhea.cnrs.fr

Aluminum gallium nitride (Al,Ga)N are the materials of choice for the fabrication of deep ultraviolet (DUV) light emitting diodes (LEDs). The major goal is to realize such devices on electrically highly conductive substrates in order to increase the external quantum efficiency of the LED. However, the epitaxial growth of nitrides on such host substrates with important differences in terms of crystalline structures and lattice parameters is complicated. On the other hand, Van der Waals epitaxy with hexagonal boron nitride (h-BN) templates has shown that it can serve this purpose. Indeed, h-BN is used as a mechanical release layer for nitride devices to be transferred to desired substrates to create flexible devices or/and DUV LEDs with vertical injection.

Conférence MATÉPI2023 Paris, 3-6 Juillet 2023

In this work, the epitaxial growth of (Al,Ga)N quantum dots (QDs) structure on h-BN followed by the structure exfoliation was investigated. The h-BN template with a thickness of 6 nm was grown on 2-inch sapphire substrate by MOVPE. Next, the MBE growth of AlN, followed by Al_{0.7}Ga_{0.3}N cladding layers and Al_{0.3}Ga_{0.7}N QDs active regions, were achieved. High QDs density was obtained ($\sim 3.6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$) and an emission in the UV-C range (278 nm) was observed by photoluminescence (PL) at room temperature. Furthermore, X-ray diffraction measurements showed twelve peaks for the AlGaN layer instead of the usual six representing a new in-plane orientation turned by 30°, thus creating two different orientations in the growth plane; an effect permitted by h-BN. The next step was exfoliating the structure with an adhesive tape. The exfoliation process was confirmed by optical microscopy and atomic force microscopy (AFM) measurements and enabled us to estimate the area distribution of the exfoliated structure on the tape: the center of the sample was the most exfoliated part, with an exfoliated surface area of $\sim 80\%$. The exfoliated surface area on the edges was $\sim 50\%$. PL at 300K confirmed an emission after the exfoliation with a peak at 278 nm. Importantly, the PL intensity was only 10 times less than the one before the exfoliation process, which at least partly originates from the different excitation path (i.e. front side vs. backside of the structure after exfoliation). Followed up was a dry transfer of the exfoliated structure onto a silicon dioxide (SiO₂)/Si substrate to test the potential of our approach for the transfer of QD-based UV emitters from the original substrate (sapphire) to another host substrate. The transfer was confirmed by optical microscopy and AFM. PL measurements showed an emission at 280 nm and the PL intensity at 300K was only 10 times less than at 12K, showing a good thermal stability thanks to the 3D confinement in the QDs. The next steps are to fabricate QDs-based LEDs on h-BN and fabricate efficient flexible UV-C LEDs.

SESSION POSTERS

Croissance par MBE de monocouches MoS₂ sur GaN

M. Al Khalfioui*¹, M.T Dau¹, A. Michon¹, A. Reserbat-Plantey¹, J. Brault¹, S. Vezian¹, B. Damilano¹, Y. Cordier¹ and P. Boucaud¹

¹Université de côte d'azur, CRHEA, CNRS, rue Bernard Grégory, 06560 Valbonne, France

*mohamed.al.khalfioui@crhea.cnrs.fr

Depuis la découverte du graphène et de ses propriétés physiques exceptionnelles, la recherche sur les matériaux bidimensionnels (2D) est très dynamique. Parmi les matériaux 2D, le disulfure de molybdène (MoS₂) a suscité beaucoup d'intérêt ces dix dernières années en raison de ses propriétés électroniques et optiques uniques et également accordables en fonction du nombre de couches [1].

La synthèse des matériaux 2D peut être réalisée soit par exfoliation, soit par épitaxie. La technique d'exfoliation est difficilement reproductible à grande échelle et aussi difficilement industrialisable. Nos travaux se sont concentrés sur la croissance de MoS₂ par épitaxie par jets moléculaires (MBE) sur une surface de nitrure de gallium (GaN). Le GaN est un matériau semi-conducteur largement utilisé en optoélectronique et en électronique, de plus sa compatibilité (structure hexagonale et paramètre de maille proche) avec le MoS₂ présente de nombreux avantages pour le développement de nouveaux dispositifs.

La croissance de MoS₂ a été réalisée à une température de croissance d'environ 700 °C dans un environnement riche en soufre et à l'aide d'un évaporateur à canon électrons pour l'évaporation du molybdène (Mo). Les paramètres de croissance tels que la température et le temps de dépôt ont été optimisés pour obtenir des monocouches de hautes qualités.

La microscopie à force atomique (AFM) a été utilisée pour caractériser la morphologie et la taille des domaines. La figure 1 montre des domaines de MoS₂ de forme triangulaire de longueur latérale moyenne de 100 nm et d'épaisseur une monocouche (~ 0,7 nm). Majoritairement, deux orientations de domaines (0° et 60°) sont observées sur la surface de GaN. Le spectre Raman (figure 2) montre les pics caractéristiques de MoS₂ à 383 cm⁻¹ (E_{2g}) et 405 cm⁻¹ (A_{1g}).

Les résultats démontrent que la MBE est une technique prometteuse pour produire des monocouches de MoS₂ de hautes qualités sur des substrats GaN. L'étude contribue à une meilleure compréhension des mécanismes de croissance de MoS₂ par MBE et ouvre des opportunités pour le développement de dispositifs électroniques et optoélectroniques à base de MoS₂

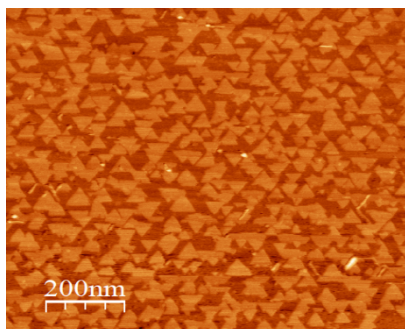


Figure 1 : Image AFM 1x1µm² montrant des « flakes » de MoS₂ sur une surface de GaN

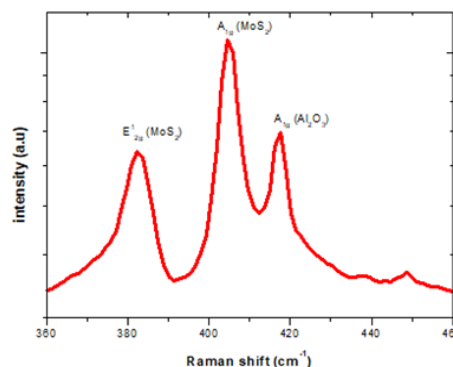


Figure 2: Spectre Raman caractéristique des vibrations du MoS₂, A_{1g} (à 405 cm⁻¹) et E_{2g} (à 383 cm⁻¹).

[1] Emerging Photoluminescence in Monolayer MoS₂, Andrea Splendiani et al, Nano Lett, 10, 1271–1275 (2010)

Croissance d'hétérostructures HEMTs ScAlN/GaN par Epitaxie sous Jets Moléculaires à source NH₃

Caroline Elias, Maud Nemoz, Hélène Rotella, Florian Bartoli*, Stéphane Vézian, Philippe Vennégues, Sébastien Chenot, Maxime Hugues, Yvon Cordier

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

Université Côte d'Azur, CNRS, CRHEA, rue B. Gregory, 06560 Valbonne, France

* florian.bartoli@crhea.cnrs.fr

L'alliage ScAlN présente des propriétés de polarisation piézoélectrique bien supérieures à celles de AlN [1], ce qui le rend intéressant pour la fabrication de dispositifs tels que des filtres RF à ondes acoustiques. Aussi, son épitaxie sur GaN permet la réalisation d'hétérostructures HEMTs générant des gaz bidimensionnels d'électrons (2DEGs) avec des densités pouvant dépasser $4 \times 10^{13}/\text{cm}^2$, l'obtention de courants importants, de même que des fréquences de coupure très élevées dans des transistors. Cependant seule l'épitaxie au moyen de la technique EJM (épitaxie sous jets moléculaires) à source plasma [2] et de l'EPVOM (épitaxie en phase vapeur aux organo-métalliques) [3] avaient été rapportées jusqu'à récemment, alors que la technique EJM à source NH_3 a permis de démontrer des transistors HEMTs AlGaIn/GaN avec des performances RF remarquables [4]. Dans ce contexte, nous avons étudié la croissance de l'alliage ScAlN tout d'abord sur des trempins GaN sur substrat Saphir, puis sur des couches tampon de GaN sur Silicium. Le premier paramètre étudié est la température de croissance pour des films épais de 25 nm environ et contenant 15% de Scandium [5]. Les analyses structurales et électriques permettent de cerner une fenêtre de température optimale autour de 670°C . La réduction de l'épaisseur de la couche ScAlN mène à une augmentation de la densité de charges dans le 2DEG et ce jusqu'à une épaisseur critique de l'ordre de 10 nm. La microscopie électronique en transmission (MET) confirme une dégradation de la qualité cristalline pour les épaisseurs supérieures. De même, l'épitaxie de couches ScAlN avec des teneurs en Scandium plus élevées révèle une dégradation des diagrammes RHEED ainsi que celle de la qualité structurale étudiée par diffraction des rayons X. L'analyse MET montre également une réduction de l'épaisseur critique. Une réduction des densités de charges est observée dans les 2DEGs générés avec les alliages plus riches en Scandium (jusqu'à 30%). L'analyse des propriétés de transport dans ces structures est en cours afin de déterminer si cet effet est lié à la seule réduction attendue du bilan des charges de polarisation électrique à l'interface ScAlN/GaN ou si elle résulte d'une dégradation de la qualité structurale dont l'origine reste à déterminer.

[1] M. A. Caro, S. Zhang, T. Riekkinen, M. Ylilampi, M. A. Moram, O. Lopez-Acevedo, J. Molarius, and T. Laurila, *J. Phys.: Condens. Matter* 27, 245901 (2015).

[2] M. T. Hardy, B. P. Downey, N. Nepal, D. F. Storm, D. S. Katzer, and D. J. Meyer, *Appl. Phys. Lett.* 110, 162104 (2017).

[3] S. Leone, J. Ligl, C. Manz, L. Kirste, T. Fuchs, H. Menner, M. Prescher, J. Wiegert, A. Zukauskaitė, R. Quay, and O. Ambacher, *Phys. Status Solidi RRL* 14, 1900535 (2020).

[4] Y. Cordier, *Phys. Status Solidi A* 212, No. 5, 1049–1058 (2015).

[5] Caroline Elias, Maud Nemoz, Hélène Rotella, Frédéric Georgi, Stéphane Vézian, Maxime Hugues, Yvon Cordier, *Appl. Phys. Lett. Mater.*, 11, 031105 (2023).

Long-range dynamic perylene ordering on Ag(110)

Kirill Bobrov* and Laurent Guillemot

Université Paris-Saclay, CNRS, Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, 91405, Orsay, France

* kirill.bobrov@universite-paris-saclay.fr

We present a room temperature STM study of dynamics of the quasi-liquid perylene monolayer formed on Ag(110) under thermal equilibrium. We observe that the thermodynamic balance of the molecule-molecule and molecule-substrate interactions generate a compact two-dimensional (2D) quasi-liquid state established by the mobile perylene molecules dynamically distributed into three distinct motion modes. The substrate provides memory to the intermingled molecules and eliminates ergodicity of the quasi-liquid state. Fourier transform of the topographies unravels the long-range spatial correlations and epitaxial character of the quasi-liquid state. Analysis of the molecularly resolved motion modes in real space indicates that the substrate force field induces the dynamical ergodic – non-ergodic phase transition, which gives rise to the stationary long-range, ordered $\begin{pmatrix} -1 & 2.5 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}$ quasi-liquid state.



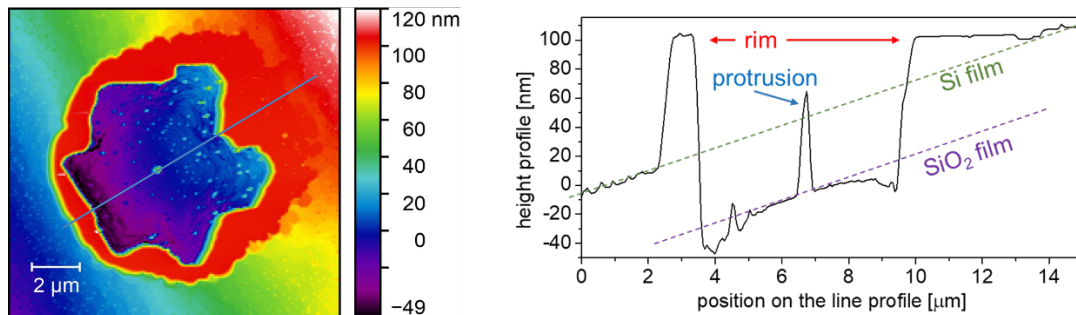
Solid state dewetting of SOI(111)

Stefano Curiotto, Fabien Cheynis, Pierre Müller, Frédéric Leroy
Aix Marseille Université, CNRS, CINaM UMR7325, 13288 Marseille, France
stefano.curiotto@cnrs.fr

The epitaxial growth of a material on another one requires a certain compatibility between the two materials. Even so, thin films deposited on a substrate are often unstable and tend to agglomerate forming isolated particles. This process is known as dewetting and can take place both in the liquid and in the solid state. The important morphological changes taking place on dewetting can make devices inoperative. This problem is of particular concern for metal silicides and SOI (silicon on insulator, typically SiO₂) structures used in microelectronics. Therefore, finding methods to avoid or to stop dewetting is important. However, if on one hand dewetting limits the reliability of some materials, on the other hand, if carefully controlled, it can be used to obtain isolated particles on a substrate.

In our group, we have been studying for a long time solid state dewetting of SOI where the Si film orientation is (100). In this work, we focus on dewetting of SOI(111), as the film orientation is a parameter that can be used in the perspective of controlling particle assemblies.

In most cases, dewetting of SOI(111) starts from holes or protrusions in the film. The starting shape of the holes is hexagonal, different from the square holes observed in SOI(100). Instabilities lead to the development of dewetting fingers from the hexagon corners. This presentation details the different steps of the dewetting mechanism for SOI(111), with focus on the Si rim formed around the hole exposing the SiO₂ substrate. Analysis of the kinetics allows us to determine an activation energy for dewetting of 3.7±0.2 eV.



Left: AFM image of a dewetting hole in SOI(111). The top of the Si rim, in red, is an atomically flat terrace. The plot profile taken along the blue line is shown on the right.

Two-dimensional materials as candidates to study the quantum spin Hall effect in microelectronics and spintronic applications

Adam Hassan Denawi (1), Roland Hayn (2), Xavier Bouju (3), Mathieu Abel (2), and Holger Vach (1)

1 CNRS, LPICM, École Polytechnique, IP Paris, Palaiseau 91128, France.

2 Aix Marseille Université, CNRS, IM2NP UMR 7334, 13397 Marseille, France.

3 Centre d'élaboration de matériaux et d'études structurales (CEMES), CNRS, Université de Toulouse, Toulouse, France.

hassan.denawi@polytechnique.edu

We have theoretically studied TM₃C₆O₆ metal-organic free-standing monolayers, where the 3d transition metals (TM) are coordinated with C₆O₆ ligands. The metal ions build a Kagome lattice, which is very famous for its unconventional topological and magnetic properties. Kagome lattice materials are well known topological quantum materials since they allow a Dirac point (in the nonmagnetic case for two spin directions) or a Weyl point (for a ferromagnetic material with only one spin direction) at a high symmetry point of the Brillouin zone. Furthermore, the Kagome lattice is interesting in magnetism due to its high degree of frustration which opens the possibility to study spin liquids.

We investigate all possible 3d transition metals (TM) between Sc and Cu in TM₃C₆O₆ and we find it highly remarkable that we discover very different realizations of several unconventional systems. In this sense, we find

Conférence MATÉPI2023 Paris, 3-6 Juillet 2023

realizations of the Heisenberg Kagome antiferromagnet with different values of the local spin to investigate the spin liquid state. We also find a Kagome lattice with ferromagnetic interactions allowing the spin ice state.

The studied group of materials is not only of academic interest since three of the calculated systems (with Mn, Cu, and Fe) could already be synthesized on the Ag(111) surface. On the other hand, its investigation of magnetic and electronic properties is only at the beginning. On-surface synthesis of conductive metal-organic covalent coordination networks becomes possible. Those networks possess a dense Kagome lattice of metallic centers thus opening a window to the unconventional electronic and magnetic properties of Kagome lattices with unconventional spin chirality on a 2D frustrated lattice and which can result in the quantum anomalous Hall effect (QAH) in the case of a Kagome metal.

We are currently studying the transition metal dichalcogenide (TMDC) of MoSe₂, MoS₂, WS₂, and WSe₂ on Graphene deposited on Germanium on Insulator (GeOI) layers. TMDC have garnered a lot of interest in recent years due to their unique electronic and optical properties, making them promising materials for various applications including spintronics. Using graphene as a substrate for TMDC can have several advantages, such as improving the quality of the TMDC films and allowing for better control of their electronic properties. The use of GeOI layers also provides compatibility with microelectronics wafers, making this system suitable for integration with existing technology. In terms of spintronics, TMDC are promising materials due to their strong spin-orbit coupling and valleytronics properties. The ability to control spin and valley degrees of freedom in TMDC could lead to the development of new types of electronic devices with enhanced performance.

Superstructures, Commensurations, and Rotation of Single-Layer TaS₂ on Au(111) duced by Cs Intercalation/De-Intercalation

Xiaorong Weng¹, Philippe David², Valérie Guisset², Lucio Martinelli², Olivier Geaymond², Johann Coraux² and Gilles Renaud¹

1. Université Grenoble Alpes, CEA, IRIG/MEM/NRS, 38000 Grenoble, France
2. Université Grenoble Alpes, CNRS, Institut NEEL 38000 Grenoble, France

* philippe.david@neel.cnrs.fr

Tantalum disulfide is a transition metal dichalcogenide, with metallic character, and prone to strong correlation effects. The bulk form is known to host charge density waves and superconducting states. This lamellar compound can be exfoliated down to a thickness of a single layer, and alternatively grown from the bottom up using molecular beam epitaxy. The latter has been demonstrated on several substrates. It was found that reaching the proper TaS₂ stoichiometry can be an issue. Besides, charge density waves are not observed on all substrates.

We use in situ synchrotron X-ray scattering and scanning tunneling microscopy to investigate with high resolution the structure of a two-dimensional single layer of tantalum sulfide grown on a Au(111) surface. This substrate is advantageous as it tends to select a well-defined orientation of the 2D layer. We find that the 2D layer can lock on the atomic lattice in two different ways, forming slightly different moirés patterns, and relate these structure to the stoichiometry of the 2D layer. We next investigate the decoupling of the layer from its substrate, using intercalation an alkali atom, cesium. Upon intercalation the moiré pattern disappears, the in-plane lattice parameter increases (1-2 pm) presumably as a result of electron donation from Cs, and the 2D layer is lifted up by almost 400 pm. We find that the thermally-induced intercalation/de-intercalation steps have some influence on the stoichiometry, and that using a reactive H₂S atmosphere is necessary to achieve full de-intercalation, presumably by preventing S depletion and the concomitant strong bonding with the intercalant. Using a cyclic intercalation/de-intercalation procedure we are able to increase the structural quality of the layer. A side-effect of this cyclic process is the rotation, by 30°, of part of the TaS₂ flakes on the surface. We ascribe this to the degree of freedom that the material acquires when it is decoupled (intercalated) from its surface. The rotated flakes exhibit new kinds of superstructures, different from the initial moirés, one of which may relate to a charge density wave.

X. Weng et al. ACS Nano 17, 5459 (2023)

Selective area MBE of in-plane InSb nanostructures on InP (111)_B substrates

Wijden Khelifi¹, P.Capiod¹, C.Coinon¹, Y.Deblock¹, D.Troadec¹, C. N. Santos¹, N.Chaize², P.-H.Jouneau³, J.-F.Lampin¹, X.Wallart¹, Ph.Ballet², B.Grandidier¹ and L.Desplanque^{1,*}

¹ Univ. Lille, CNRS, Centrale Lille, ISEN, Univ. Valenciennes, UMR 8520 - IEMN, F-59000 Lille, France

² CEA, LETI, Univ. Grenoble Alpes, 38000 Grenoble, France



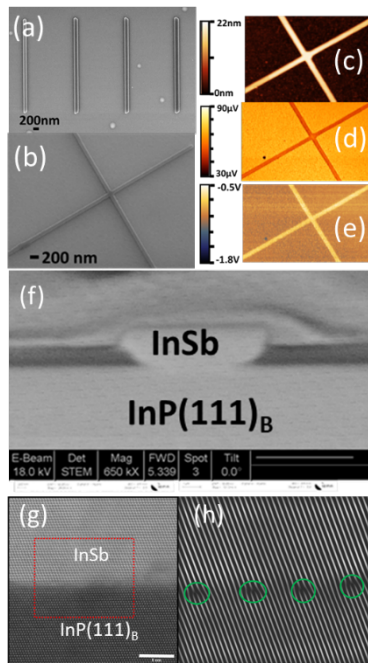


Fig. 1 - SEM images of in-plane InSb nanostructures grown on InP(111)_B (a and b). Near field analysis of the sample: AFM (c), SNOM amplitude (d) and phase (e). STEM analysis of one in-plane InSb nanowire: FIB-STEM preparation (f), HRTEM (g) and numerical filtered image highlighting interface dislocations (h).

With their low electron effective mass and strong-spin orbit coupling, InSb quantum wells and nanowires are particularly appealing for the fabrication of quantum devices based on the ballistic transport of electrons^{1,2}. However, their integration on standard semi-insulating GaAs(100) or InP(100) substrates is very challenging considering the large lattice mismatch of InSb with these materials³. In this work, we focus on the growth of thin InSb layers on (111)_B oriented substrates with which the impact of lattice mismatch is reduced². Scanning electron microscopy and near-field experiments are carried out to optimize the growth of InSb 2D islands on InP(111) before controlling their position and shape using selective area epitaxy inside SiO₂ mask openings.

As shown in figure 1, the growth conditions established for the optimization of InSb thin film (low growth rate, atomic hydrogen flux and very large Sb/In flux ratio) enable the achievement of continuous and smooth InSb nanostructures inside narrow openings. Within these conditions, 100nm wide in-plane nanowires as long as 100μm can be achieved. The morphological, structural and optical properties of the nanostructures are evidenced using AFM, TEM and scattering-type scanning near-field optical microscopy (s-SNOM) at a wavelength of 8.86 μm (fig. 1). The impact of the incoherent interface between InSb and InP on the electronic properties of the material is also investigated by means of Hall effect, XPS and scanning tunneling microscopy.

This study is financially supported by the French National Research agency (INSPIRING project ANR-21-CE09-0026-01 and COMI project ANR-17-CE24-0002), the French Technological Network Renatech, and the Région Hauts de France.

Hetero-Epitaxy of Layered Chalcogenides GaSe and Bi₂Se₃ on Graphene-SiC and GaAs(111)B substrates : dependence of the structural, electronic and optical properties with on the film thickness

M. Eddrief^{1*}, P. Atkinson¹, A. Ouerghi²

¹ Sorbonne Universités, UMR 7588, INSP, 4 place Jussieu, F-75005, Paris, France.

² Université Paris-Saclay, CNRS, Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies, 91120, Palaiseau, France.

* mahmoud.eddrief@insp.jussieu.fr

¹ Ch. A. Lehner *et al*, Phys. Rev. Mat. 2, 054601 (2018) ; C.T. Ke *et al*, Nature Comm. 10, 3764 (2019)

² R.L.M. Op het Veld *et al*, Comm. Phys. 3, 59 (2020) ; P. Aseev *et al*, Nano Lett. 19, 9102–9111 (2019); Aseev *et al*, Nano Lett. 19, 9102-9111 (2019)

³ L. Desplanque *et al*, Nanotechnology 29, 305705 (2018)

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

We present here studies of two layered chalcogenide compounds grown by MBE at the INSP on 2D and 3D substrates: the semiconductor GaSe grown on graphene [1-3] and the topological insulator Bi₂Se₃ grown on GaAs (111)B [4-6] (see e.g. fig.1).

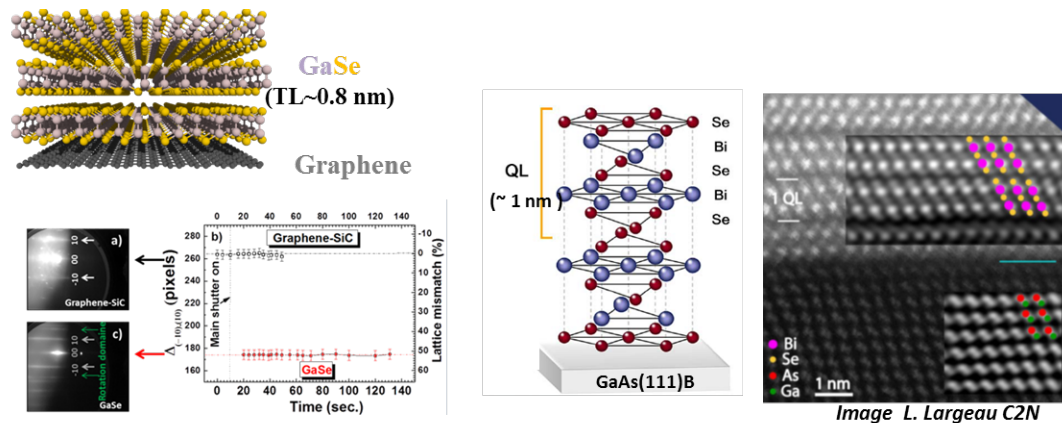


Figure 1: Hetero-Epitaxy of GaSe/Graphene-SiC and Bi₂Se₃/GaAs(111)B, schematic hetero-structure with RHEED GaSe growth sequence and TEM image of Bi₂Se₃/GaAs hetero-interface.

We will discuss the structural quality of the epitaxially grown thin films - as probed both reflection high-energy electron diffraction (RHEED), X-ray diffraction (XRD) and by transmission electron microscopy (TEM), demonstrating hetero-epitaxy from the first epitaxial layer under weak film-substrate interactions (van der Waals or quasi-van der Waals) [1-4]. Angle- and polarization-resolved photoemission will be presented, demonstrating the evolution of the electronic structure as a function of the thickness of the films (in the limit of the elemental mono-sheet with around nanometer thickness) [2-4]. We will also present the optical properties of the epitaxial films, in particular the sensitivity of the optical responses due to crystal symmetry breaking in ultra-thin films [5, 6].

- [1] Z. Ben Aziza, H. Henck, D. Pierucci, M. G. Silly, E. Lhuillier, G. Patriarche, F. Sirotti, M. Eddrief, and A. Ouerghi, ACS Nano 2016, 10, 9679–9686.
- [2] Z. Ben Aziza, D. Pierucci, H. Henck, M. G. Silly, C. David, M. Yoon, F. Sirotti, K. Xiao, M. Eddrief, J.-C. Girard, and A. Ouerghi, Phys. Rev. B 96, 035407 (2017).
- [3] Z. Ben Aziza, V. Zólyomi, H. Henck, D. Pierucci, M. G. Silly, J. Avila, Samuel J. Magorrian, J. Chaste, C. Chen, M. Yoon, K. Xiao, F. Sirotti, M. C. Asensio, E. Lhuillier, M. Eddrief, V. I. Fal'ko, and A. Ouerghi, Phys. Rev. B 98, 115405 (2018).
- [4] F. Vidal, M. Eddrief, B. Salles, I. Vobornik, E. Velez-Fort, G. Panaccione and M. Marangolo, Phys. Rev. B 88(R) 241410 (2013).
- [5] M. Eddrief, P. Atkinson, V. Etgens and B. Jusserand, Nanotechnology 25, 245701 (2014).
- [6] M. Eddrief, F. Vidal and B. Gallas, J. Phys. D: Appl. Phys. 49, 505304 (2016).

Tailoring the magnetic and electrical properties of the geometrically frustrated CoV₂O₄ in pulsed laser deposited thin films.

Lamiae EL KHABCHI*, Antonio PEÑA CORREDOR, Laurent SCHLUR, Marc LENERTZ, Jérôme ROBERT, Cédric LEUVREY, Gilles VERSINI, François ROULLAND, Daniele PREZIOSI, Christophe LEFEVRE, Nathalie VIART
Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg - IPCMS
UMR 7504 Université de Strasbourg-CNRS, 67000 Strasbourg, France
*lamiae.elkhabchi@ipcms.unistra.fr

Transition metal oxides constitute an intriguing playground within the strongly correlated materials thanks to their diverse degrees of freedom that are charge, spin, orbital and lattice. Spinel vanadates of general formula AV₂O₄ (A = transition metal) have particularly captured the attention of the condensed matter community because of their versatile magnetic and electric properties.

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

CoV₂O₄ (CVO), in particular, is a unique spinel oxide, because not only does it have a pyrochlore sublattice formed by the magnetically active V³⁺ atoms which are geometrically frustrated, but it also has the shortest V-V distance among spinel vanadates and is very close to a Metal-to-Insulator Transition (MIT). These two main assets make CVO a potential candidate for several low power electronics devices, such as the Spin-Orbit Torque Magnetic Random Access Memories (SOT-MRAM) or the Mott-transition based Resistive Random Access Memories (RRAM).

In this perspective, our aim is to control and manipulate the spins orientation and frustration as well as the V-V distances by growth engineering. We use the pulsed laser deposition (PLD) technique to grow CVO thin films onto well-chosen substrates that will exert different kinds of strain (compressive/tensile) in order to see their effect in terms of structural, magnetic and electrical properties of the CVO thin films. Studies on CVO thin films are very scarce, with only four publications and non-converging results. All films are grown in a compressive state, either on SrTiO₃ (STO) [1] or on (La_{0.3}Sr_{0.7})(Al_{0.65}Ta_{0.35})O₃ (LSAT) [2] substrates, which rather pushes the system into the insulating state. The targets are always different from the CVO spinel phase, which is rather difficult to synthesize.

The originality of our approach relies both on the choice of the target from which deposition is made, as well as on the choice of the substrate. Our target is a CVO spinel single-phased target which we successfully elaborated through a solid state chemistry optimized method. The choice of MgO for a substrate allowed us to probe new strain states (tensile) with respect to STO and LSAT (both compressive). We will present our preliminary results showing that the elaborated CVO thin films are fully strained, in a tetragonal structure, and show magnetic transitions similar to the bulk.

Acknowledgments: This work was partly supported by the ITI QMat, which as part of the ITI 2021 2028 program of the University of Strasbourg, CNRS and Inserm, was supported by ANR 10 IDEX 0002, ANR 20 SFRI 0012, ANR-11-LABX-0058-NIE and ANR-17-EURE-0024.

[1] C. J. Thompson et al, *Spin canting and orbital order in spinel vanadate thin films*, Physical Review Materials **2**, 104411 (2018).

[2] B. C. Behera et al, *Tailoring magnetism in spinel vanadate CoV₂O₄ epitaxial thin films*, Journal of Physics: Condensed Matter **33**, 365801 (2021).

ICLs à 3,3 μm sur substrats de GaSb, GaAs et Si (001)

M. Fagot⁺, D. Diaz-Thomas, A. Gilbert, G. Ndemengoye, Y. Rouillard, J.B. Rodriguez, E. Tournié and L. Cerutti*

IES, Univ. Montpellier, CNRS, 34000 Montpellier, France.

+ maeva.fagot@umontpellier.fr * laurent.cerutti@umontpellier.fr

Les lasers à cascade interbande (ICL) à base d'antimoine sont aujourd'hui les principales sources optoélectroniques utilisées dans la gamme 3 – 6 μm du Moyen Infrarouge. Ils sont technologiquement importants pour diverses applications, telles que la spectroscopie, la détection/analyse de gaz et la communication en espace libre [1]. Or, leur coût de fabrication ainsi que la taille des substrats de GaSb disponible limitent leur déploiement industriel. Pour cette raison, il est nécessaire de trouver des alternatives pour faciliter leur industrialisation. La croissance d'ICLs sur des substrats compatibles avec les technologies Si et GaAs semble être la solution idéale. Cependant, le large désaccord de paramètre de maille entraîne la formation de dislocations qui introduisent des niveaux profonds dans le gap. Ces derniers piègent les porteurs et dégradent les performances des lasers, limitant ainsi leur durée de vie. Toutefois, il a été récemment montré que le design particulier de la zone active des ICLs permet d'être tolérant à ces défauts [2].

Dans cette étude, nous avons réalisé la croissance par épitaxie par jets moléculaires d'une structure ICL simultanément sur GaSb, GaAs et Si (001). Cette structure, conçue pour émettre à 3,3 μm, est constituée d'une zone active à 5 étages, comprise entre deux couches de GaSb et deux claddings en super réseaux InAs/AlSb. Les propriétés structurales des trois structures ont été étudiées par diffraction par rayons X (Figure 1). Puis, des lasers de différentes largeurs (5, 8 et 10 μm) et de 2 mm de long ont été fabriqués et soudés côté épitaxie vers le haut avec le contact inférieur pris dans le cladding inférieur. Les lasers ont tous fonctionné en continu à température ambiante. La Figure 2 présente les caractéristiques PIV d'un ICL de 8 μm. On constate que le courant seuil est similaire (~40 mA) pour les ICLs réalisés sur les trois substrats et que la puissance émise par facette est de 43 mW sur GaSb, de 37 mW sur GaAs et de 32 mW sur Si. Cette diminution peut s'expliquer par une tension

plus importante, qui induit une plus grande élévation de la température dans la zone active pour les substrats concernés. Ces résultats prometteurs ouvrent la voie vers le développement d'ICLs à faible coût et leur production à grande échelle. Cela représente aussi une solution viable pour la fabrication de lasers performants sur des circuits intégrés photoniques (PICs).

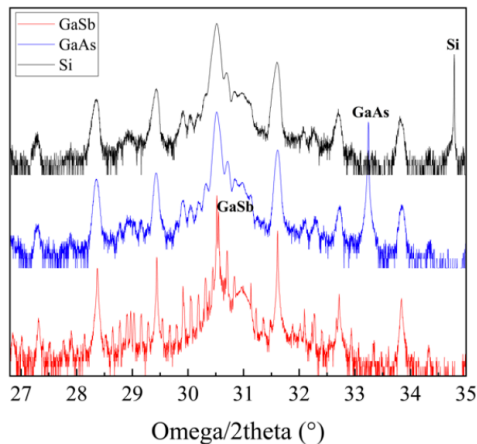


Figure 1 : Scan de diffraction de rayons X des ICLs sur GaSb, GaAs et Si

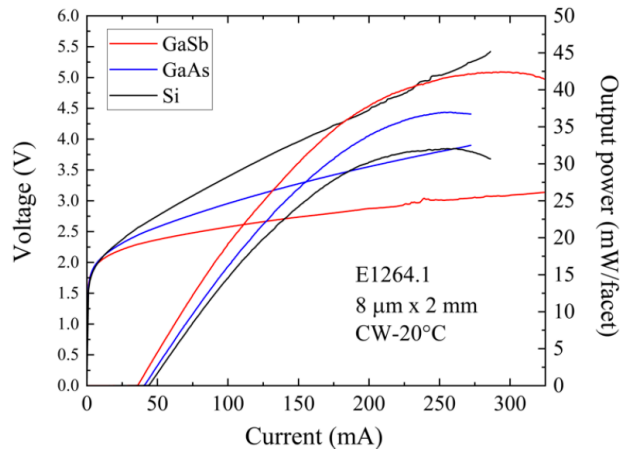


Figure 2 : Courbes PIV d'ICLs 8 μm x 2 mm à 20°C en continu

- [1] J. R. Meyer et al, Photonics, vol. 7, Art n° 3
[2] L. Cerruti et al, Optica, vol. 8, n°11, p. 1397

Structural disorder in SrTiO₃ based Ruddlesden-Popper phases

C. Furgeaud¹, A. Danescu¹, R. Bachelet¹, L. Largeau², M. Bouras³ and G. Saint-Girons¹

⁴ INL-UMR5270/CNRS, 36 avenue Guy de Collongue, 69134 Ecully cedex (France)

⁵ Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies, Université Paris-Saclay, CNRS, Palaiseau (France)

⁶ GEMaC, UVSQ, CNRS, Université Paris Saclay (France)

(SrTiO₃)_n(SrO) Ruddlesden-Popper homologous series (RP phases) present outstanding physical properties such as high T_c superconductivity, colossal magneto-resistance, low loss dielectricity, ferroelectricity, low thermal conductivity for heat harvesting, engineerable optical properties, all of them being tuned by the RP order n [1-3]. This flexibility of properties engineering boosts active researches.

The elaboration of these compounds is a true challenge: whereas RP phases with order n ≤ 3 can be synthesized by melt growth, there is no driving force for the spontaneous formation of RP phases with n > 3 [4]. The latter can be elaborated by epitaxial growth, and particularly by molecular beam epitaxy (MBE) allowing layer by layer deposition. However, the RP structural quality is highly sensitive to incident elemental flux drift, which typically cause the formation of vertical SrO stacking faults [5] causing structural disorder and affecting the RP functional properties.

In this contribution, we will present a detailed High Resolution Scanning Transmission Electron Microscopy and Electron Energy Loss Spectroscopy study of the structural disorder of (SrTiO₃)_n(SrO) thin layers grown by molecular beam epitaxy on SrTiO₃ substrates. We will particularly focus on the different vertical SrO stacking fault configurations and their impact on the RP phase order. To have a multi-scaling approach, we will also compare and correlate HRTSTEM with X-ray Diffraction analysis for a better and detailed understanding of the structural disorder in SrTiO₃ based Ruddlesden-Popper phases.

- [1] G. A. Pan et al., Nat. Mater. 21, 160 (2022)
[2] Y. Moritomo, A. Asamitsu, H. Kuwahara, and Y. Tokura, Nature 380, 141 (1996)
[3] N. M. Dawley et al., Nat. Mater. 19, 176 (2020)
[4] G. J. McCarthy, W. B. White, and R. Roy, J. Am. Ceram. Soc. 52, 463 (1969)
[5] Y. F. Nie et al., Nat. Commun. 5, 4530 (2014)

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

Unravelling the complex optical properties of heterogeneous transparent and conducting vanadates thin films grown on a 2D nanosheet layer by the means of Spectroscopic Ellipsometry

A. Boileau¹, S. Hurand², F. Baudouin³, U. Lüders¹, M. Dallochio¹, B. Bérimi⁵, A. Cheikh¹, A. David¹, F. Paumier², T. Girardeau², P. Marie⁶, C. Labbé⁶, J. Cardin⁶, D. Aureau⁷, M. Frégnaux⁷, M. Guilloux-Viry³, W. Prellier¹, Y. Dumont⁵, V. Demange³, A. Fouchet¹

¹ Normandie Univ, ENSICAEN, UNICAEN, CNRS, CRISMAT, 14000 CAEN, France

² Institut Pprime, UPR 3346 CNRS-Université de Poitiers-ENSMA, SP2MI, 86962 Futuroscope-Chasseneuil Cedex, France

³ Univ Rennes, CNRS, ISCR – UMR 6226, ScanMAT – UMS 2001, F-35000 Rennes, France

⁵ GEMaC, Université Paris-Saclay, UMR 8635 CNRS- Université de Versailles Saint-Quentin en Yvelines, Versailles, France

⁶ CIMAP, ENSICAEN – UNICAEN – CNRS, Caen, France

⁷ ILV, CNRS UMR 8180, Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines – Université Paris-Saclay, Versailles 78035, France

Indium-tin-oxide (ITO) is a widely employed transparent conducting oxide (TCO), but indium scarcity and price encourage developing some alternatives. The correlated metals CaVO_3 and SrVO_3 have been recently identified as new TCOs with functional properties being comparable to ITO [1]. However, their technological potential is limited by the critical requirement of a perovskite structure of the film, impossible to achieve by a direct growth on substrates commonly used for applications. In a recent work [2], we tackle this limitation by demonstrating the crystalline growth of vanadate TCOs on glass at temperatures below 600 °C, with the help of 2D nanosheets as transparent seed layers. The functional properties do not suffer from the textured structure of the films, as confirmed by an in-depth spectroscopic ellipsometry study, thus providing an industrially viable approach to integrate vanadate TCOs on virtually any surface and to exploit their promising performances as a new generation TCO.

To investigate the optical properties of such complex heterogeneous thin films, there is a need to develop the adequate tools. Indeed, the thin films result in a percolating network of crystalline CaVO_3 and SrVO_3 , on the regions of the film covered by the nanosheet, with the inclusion of amorphous CaVO_3 and SrVO_3 on the regions not covered by them. We use advanced optical models taking into account the anisotropic and heterogeneous nature of the film in order to decorrelate and quantify the contributions of these two phases (crystallized and amorphous) by the means of spectroscopic ellipsometry. We are thus able to extract the optical indexes of the crystallized phase, and its coverage rate in the film. As CaVO_3 and SrVO_3 exhibit strong electronic correlations, we also investigate the infrared optical properties of these films in order to determine their effective mass and plasma frequency through a generalized Drude model analysis. This innovative optical modelling provides a framework to investigate the optical properties of such heterogeneous thin films grown on a nanosheet template.

[1] L. Zhang, Y. Zhou, L. Guo, W. Zhao, A. Barnes, H.-T. Zhang, C. Eaton, Y. Zheng, M. Brahlek, H. F. Haneef, N. J. Podraza, M. H. W. Chan, V. Gopalan, K. M. Rabe, R. Engel-Herbert, *Nat. Mater.* 2015, 15, 204

[2] A. Boileau, S. Hurand, F. Baudouin, U. Lüders, M. Dallochio, B. Bérimi, A. Cheikh, A. David, Fabien Paumier, Thierry Girardeau, P. Marie, C. Labbé, J. Cardin, M. Guilloux-Viry, W. Prellier, Y. Dumont, V. Demange, A. Fouchet, *Highly Transparent and Conductive Indium-Free Vanadates Crystallized at Reduced Temperature on Glass Using a 2D Transparent Nanosheet Seed Layer*, *Adv. Funct. Mater.* 2021, 2108047

EQUIPEX NANOFUTUR : IMPLANTATION D'UN CLUSTER DE CROISSANCE POUR LES MATÉRIAUX ET COMPOSANTS III-V EPITAXIES A L'INSTITUT FOTON

M. Jullien, T. Rohel, N. Chevalier, A. Rambaud, R. Gautheron-Bernard, N. Bertru, C. Cornet
Univ Rennes, INSA Rennes, Institut FOTON – UMR 6082, F-35000 Rennes, France

Les équipements existants et à venir de l'équipe Epitaxie de l'institut FOTON à Rennes créent un outil unique qui associe trois bâtis de dépôt, une chambre de préparation de surface de silicium et une valise de transfert, l'ensemble interconnecté par un tunnel sous ultra vide.

Dans un contexte où la physique fondamentale, ainsi que la fonctionnalité des dispositifs pour l'énergie et l'électronique/optique, entre autres, ne sont plus dictés par les propriétés de matériaux massifs, mais par les



Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

propriétés de surface et d'interface. Les matériaux, leurs surfaces et interfaces peuvent être synthétisés, contrôlés et caractérisés in situ dans un environnement ultra-vide.

Dans cette contribution, nous présentons une partie du projet d'implantation nommé Equipex Nanofutur qui a permis à l'institut FOTON de développer son parc instrumental.

Le cluster est articulé le long d'un « pipeline » linéaire sous ultra vide où les échantillons sont transportés à l'aide de caissettes sur lesquelles il est possible de charger des porte-échantillons de 4 pouces de diamètre. Par le biais de cannes de transfert, les échantillons de trois pouces (ou plaquettes de type omicron) peuvent être transférés vers et depuis les différentes enceintes.

De cette manière, 3 chambres de croissance (Gaz Source MBE, Solid Source MBE et UHV-CVD) et 1 chambre de préparation de surface sont connectées entre elles. Ainsi, des films synthétisés peuvent être transportés vers et depuis l'une et l'autre des chambres de croissance dans un environnement ultra vide de 10^{-10} Torr. Ce qui permet une protection optimale de l'oxydation ou d'autres modifications structurales ou chimiques liées à l'atmosphère.

Les semi-conducteurs de la filière Si, InP et GaP peuvent être ainsi réalisés afin de créer des échantillons multi-matériaux à l'échelle atomique ou des hétérostructures complexes.

Les activités du laboratoire, internationalement reconnues dans le domaine des émetteurs InP comme sources laser V(E)CSEL [1], de l'étude des défauts cristallins de GaP/Si (001) [2] ou encore les cellules solaires tandem [3] offrent une opportunité de croissances épitaxiales de structures III-V (ternaires, quaternaires) sur wafer de Silicium parfaitement contrôlées. Les récents résultats du groupe rennais encrent la dynamique dans ces diverses thématiques de recherche et ce nouvel équipement ouvre de nouvelles perspectives significatives notamment en termes d'épitaxie hétérogène, d'hybridation et de reprises de croissance.

En conclusion, cet outil ne donne pas seulement accès à une plate-forme articulée autour d'enceintes de croissance épitaxiales et de préparation de surface, mais il permettra également le développement de collaborations -par le biais du réseau Renatech du CNRS dont la plateforme technologique NanoRennes fait partie- et le transfert d'échantillons vers et depuis les grands instruments.

Ces travaux de recherche et ce développement instrumental sont soutenus par les projets ANR PIANIST (ANR-21-CE09-0020), EPCIS (ANR-20-CE05-0038), NAUTILUS (ANR-22-PEHY-0013), PEPR Electronic OFCOC, EQUIPEX NANOFUTUR (ANR-21-ESRE-0012), Rennes Métropole, la Région Bretagne, le CNRS et son réseau Renatech +, l'INSA Rennes.

[1] C. Paranthoen et al, IEEE Photon. Technol. Lett. 33, 59 (2021)

[2] T. Quinci et al, Journal of Crystal Growth 380, 157-162 (2013)

[3] N. Barreau et al, EPJ Photovoltaics 13, 17 (2022)

Mécanismes à l'origine de la croissance épitaxiale de nanofils de GaN sur graphène

L. Largeau^{1*}, C. Barbier¹, D. Tamsaout¹, C. Durand², J. Eymery², T. Zhou², G. Renaud², H. Montigaud³, N. Gogneau¹, L. Travers¹, A. Madouri¹, A. Cavanna¹, A. Cattoni¹, F. Glas¹ M. Tchernycheva¹, and J.-C. Harmand¹

¹ Université Paris-Saclay, CNRS, Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies (C2N), 91120, Palaiseau, France

² Université Grenoble Alpes, CEA, IRIG, PHELIQS, NPSC, 38000 Grenoble, France

³ Saint-Gobain, CNRS, Surface Verre & Interfaces, 93300 Aubervilliers, France

* ludovic.largeau@c2n.upsaclay.fr

Les semi-conducteurs à base de nitrides d'éléments III sont largement utilisés pour la fabrication de dispositifs micro-électroniques et opto-électroniques. Bien que de nombreux dispositifs à base d'alliages III-N soient déjà commercialisés, leurs performances peuvent rester impactées par une densité importante de défauts résiduels dans les couches actives, liée à l'absence de substrat natif disponible à faible coût. L'utilisation du graphène comme substrat présente deux grands avantages. Ultimement mince, il représente une alternative aux substrats massifs. D'autre part, la croissance de nanostructures sur graphène permet de transférer l'ensemble sur d'autres supports, notamment flexibles pour le développement d'écrans souples. Nous avons démontré que le graphène peut imposer une relation épitaxiale au GaN, même sans substrat cristallin sous-jacent [1].

Dans la présente étude, nous explorons les mécanismes qui régissent cette croissance épitaxiale par jets moléculaires (EJM) assistée par plasma.

Conférence MATÉPI2023 Paris, 3-6 Juillet 2023

Nous avons exploré les changements de surface qui se produisent pendant la longue période d'incubation (typiquement 90 min dans nos conditions de croissance sélective sur graphène) et qui sont à l'origine de la nucléation de GaN. Nous avons observé par microscopie à force atomique (AFM) que l'exposition au plasma N produit de petites gravures dans la couche de graphène et la spectroscopie photoélectronique à rayons X (XPS) indique que des atomes de N s'incorporent dans des sites pyridiniques révélés par ces gravures. Ces atomes pourraient être les points d'ancrage des premiers germes de GaN.

Nous avons par ailleurs mis en évidence, par diffraction de rayons X in-situ au synchrotron ESRF, la forte contrainte du GaN au moment de la nucléation suivie d'une relaxation [2].

Enfin, nous avons réalisé des tests de déplacement des nanofils à l'aide d'une pointe AFM qui ont révélé que nos nanostructures sont fortement liées au graphène.

Toutes ces observations tendent à montrer que, dans nos conditions, l'épitaxie entre le GaN et le graphène n'est pas uniquement due à des interactions faibles de type Van der Waals mais que des liaisons chimiques sont impliquées dans cette relation épitaxiale.

[1] V. Kumaresan, L. Largeau, A. Madouri, F. Glas, H. Zhang, F. Oehler, A. Cavanna, A. Babichev, L. Travers, N. Gogneau, M. Tchernycheva and J.-C. Harmand, *Nano Lett.* 16 (8), 4895–4902 (2016).

[2] C. Barbier, T. Zhou, G. Renaud, O. Geaymond, P. Le Fèvre, F. Glas, A. Madouri, A. Cavanna, L. Travers, M. Morassi, N. Gogneau, M. Tchernycheva, J.-C. Harmand and L. Largeau, *Cryst. Growth Des.* 20, 6, 4013–4019

Ferro to antiferromagnetic transition in epitaxial thin films of $Mn_5(Si_xGe_{1-x})_3$ thin films grown on Ge(111) substrate

Sueyeong Kang¹, Vasile Heresanu¹, [Lisa Michez](#)^{1*}, Matthieu Petit¹,
Ewa Jedryka², Roger Kalvig², Marek Wojcik²

¹ Aix Marseille Univ, CNRS, CINaM, Marseille, France

² Institute of Physics, Polish Academy of Sciences, Aleja Lotników 32/46, PL–02668 Warsaw, Poland

*lise.michez@univ-amu.fr

Mn_5Ge_3 and Mn_5Si_3 alloys crystallizes in the same hexagonal $D8_8$ structure ($P6_3/mcm$ space group) (see inset of Fig. 1a). In both compounds, the manganese atoms are located in two different crystallographic sites, so-called Mn_I and Mn_{II} , corresponding to the Wyckoff positions 4(d) and 6(g), respectively. Despite these similarities, their magnetic behaviour is very different. Mn_5Ge_3 is strongly ferromagnetic with a Curie temperature of 296 K, while Mn_5Si_3 is a complex antiferromagnet with a temperature- and field-dependent magnetic structure. The two compounds can be alloyed over the whole Ge-Si concentration range, which makes this system ideal to study the transition occurring from a ferromagnetic state (Mn_5Ge_3) to an antiferromagnetic state (Mn_5Si_3).

In this context, we present here the epitaxial growth of $Mn_5(Si_xGe_{1-x})_3$ thin films on Ge(111) substrate by Molecular Beam Epitaxy using a codeposition technique. Their structural properties have been thoroughly characterized using reflection high-energy electron diffraction, x-ray diffraction, atomic force microscopy and transmission electron microscopy while the magnetic properties have been investigated using vibration sample magnetometry (VSM) and ^{55}Mn Nuclear Magnetic Resonance (NMR) which acts as a very sensitive local probe of the Mn atoms environment.

Upon silicon substitution two effects are readily visible: i) the decrease of the lattice parameters (Fig. 1a) is associated with a diminution of the Mn magnetic moment on both Mn sites as measured by VSM and evidenced by the shift towards lower frequencies in the NMR spectra (Fig. 1b and 1c); ii) the apparition of a new Mn environment with a reduced magnetic moment for part of the Mn_{II} atoms as demonstrated by the broadening of the NMR signal measured around 420 MHz. The thorough analysis of structural and magnetic data shows that substitution of Ge atoms by Si significantly modifies the exchange interactions involving the 6(g) manganese sites, leading to a drop of the magnetic moment of those Mn_{II} atoms that have Si neighbour instead of Ge. The effect on the Mn_I sites is secondary and consists in a smaller contribution of the transferred hyperfine field due to the reduced magnetic moment of the Mn_{II} neighbours and a loss of the quadrupolar structure due to the inhomogeneity brought by Ge/Si replacement.

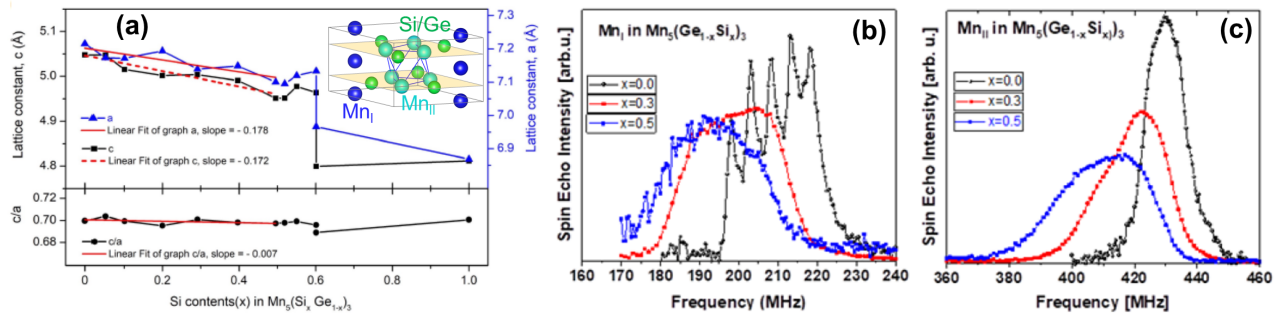


Figure 1: (a) Dependence of the lattice parameters a and c and their ratio as a function of the silicon content x in $\text{Mn}_5(\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x})_3$ epitaxial thin films. Inset: unit cell of the Mn_5Si_3 -type structure. (b) and (c) Mn_I and Mn_{II} environments, respectively, of the ^{55}Mn NMR spectra recorded at 4.2 K from 60 nm-thick films with Si concentration of 0, 0.3 and 0.5.

Épitaxie sélective de nanofils ZnO sur saphir

Vincent Sallet^{1*}, Christèle Vilar¹, Gaëlle Amiri¹, Corinne Sartel¹

¹ GEMAC, CNRS, Université de Versailles St Quentin en Yvelines, Université Paris-Saclay, 45 avenue des Etats-Unis, 78035 Versailles cedex, France

* vincent.sallet@uvsq.fr

Ce travail s'inscrit dans le cadre du projet ANR "SPINOXIDE" 2019-2023 qui étudiera l'injection et la détection de spin dans des nanostructures tout oxyde. L'objectif est d'explorer une structure hybride, combinaison d'un oxyde ferrimagnétique ayant une T_c élevée, tel que Fe_3O_4 ou FeTiO_3 , avec l'oxyde semiconducteur ZnO pour obtenir une injection et détection de spin efficace à 300K.

Des réseaux de nanofils ZnO doivent être spécialement conçus pour augmenter davantage la durée de vie de spin des électrons, déjà élevée dans ZnO, en supprimant efficacement le mécanisme de relaxation, cela par le confinement spatial des électrons sur des dimensions bien inférieures à la longueur spin-orbite (typiquement de l'ordre du μm). Dans ce contexte, nous devons étudier la croissance localisée des nanofils, en utilisant la technique dite de "croissance sélective". A partir d'un réseau de trous gravés dans un masque diélectrique SiN préalablement réalisé sur un substrat de saphir, on procède à la croissance des nanofils par EPVOM (épitaxie en phase vapeur par décomposition d'organométalliques). La nucléation de ZnO étant défavorable sur la surface diélectrique, il s'agit, grâce à la mobilité des espèces, de localiser la croissance vers les surfaces découvertes du substrat, c'est-à-dire les trous du masque. Leur diamètre et la distance inter-trous sont ainsi deux paramètres à ajuster pour un dépôt réellement sélectif.

Le dépôt de SiN et le masque de trous ont été réalisés au LTM-Grenoble via un projet RENATECH. Les nanofils sont crus à haute température (800-900°C) à l'aide des précurseurs DEZn et N_2O . Les paramètres de croissance sont étudiés : température, pression du réacteur, rapport des flux O/Zn. Des reprises de coquilles ZnO sur des fils préalablement formés ont aussi été réalisées. Une fois élaborés, les réseaux de nanofils sont observés par microscopie à balayage.

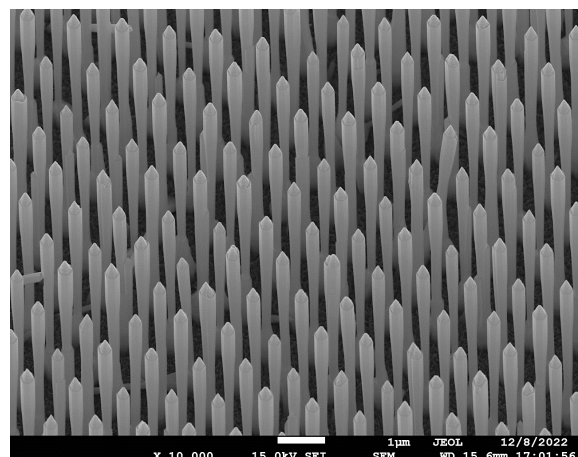
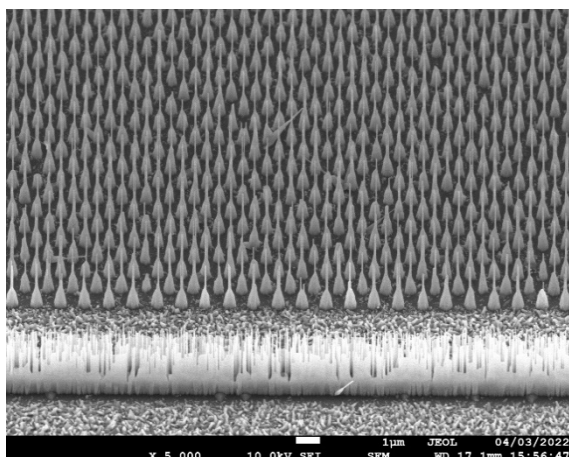


Figure : (gauche) image de microscopie à balayage du début de la croissance sélective d'un réseau de nanofils ZnO sur saphir (diamètre trous 50 nm, pas 1 μ m), et (droite) après une reprise d'une coquille ZnO.

Conception de microcapteurs à base de nanocarbones décorés par des nanoparticules métalliques pour la détection sélective de polluants soufrés (SO₂, H₂S)

C. Varenne *1, A. Ndiaye 1, J. Brunet 1 A. Pauly 1

1Université Clermont Auvergne, Clermont Auvergne INP, CNRS, Institut Pascal,
F-63000 Clermont-Ferrand, France,

[*christelle.varenne@uca.fr](mailto:christelle.varenne@uca.fr)

Cette étude est consacrée à la conception de capteurs résistifs pour la détection sélective de polluants gazeux soufrés, le sulfure d'hydrogène H₂S et le dioxyde de soufre SO₂. Ces deux gaz, émis à la fois naturellement et par le biais d'activités humaines, sont considérés comme toxiques et mortels par inhalation à forte concentration. Ils nécessitent donc une surveillance et un contrôle pour la sécurité et la santé des personnes.

La stratégie que nous avons développée, a été d'associer une matrice nanocarbonée à des nanoparticules métalliques (NPs) par deux méthodes de décorations différentes pour cibler la sélectivité. Pour réaliser ces capteurs nous avons utilisé le graphène et ses dérivés comme couches sensibles. En effet le graphène est un matériau 2D très utilisé pour les applications capteurs grâce à sa grande surface spécifique et ses propriétés électroniques exceptionnelles. Cependant sa bande interdite nulle, limite son utilisation pour une application comme capteur résistif. Une solution est alors d'oxyder le graphène (GO) afin d'ouvrir et d'ajuster le gap. Ainsi, la génération de groupements oxygénés par oxydation permet de créer des sites actifs pour nos capteurs de gaz résistifs. Mais selon le niveau d'oxydation, le GO peut devenir trop résistif pour une application capteur. C'est pourquoi des processus de réduction sont utilisés pour limiter ce taux d'oxydation. Ce processus de réduction consiste à éliminer une partie des groupements contenant de l'oxygène, rendant ainsi le matériau moins résistif. Du fait des défauts et des groupements générés, l'oxyde de graphène réduit (RGO) apparaît comme un bon candidat pour la détection de gaz. La décoration métallique a été quant à elle réalisée avec de l' Au, du Cu, du Pd et du Pt, par voie chimique avec réduction d'ions métalliques et par voie physique avec évaporation thermique (Figure 1).

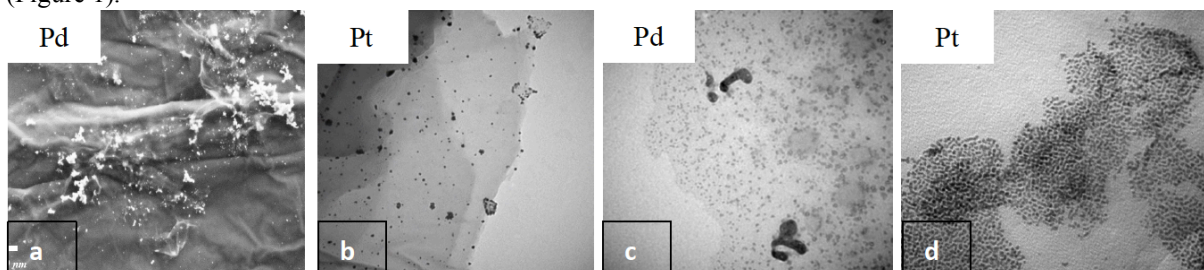


Figure 1 : (a, b) décoration chimique, (c, d) décoration physique

Afin de caractériser morphologiquement le RGO et les décorations, des analyses par microscopie électronique à balayage et par microscopie électronique à transmission (MEB et MET) ont été réalisées. Après réalisation des décorations métalliques, les composites ont été exposés aux gaz cibles. Pour évaluer leurs performances de détection, une étude sur l'influence de la méthode de décoration, du taux de décoration ainsi que de la température a été réalisée et nous a permis de mettre en évidence trois composites intéressants pour la détection du H₂S et SO₂, dont deux présentant une sélectivité partielle vis-à-vis du SO₂. En effet, en créant ces interactions spécifiques avec les gaz, la décoration est un point clé, pour résoudre le problème de sélectivité inhérent à tous les capteurs.

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

Enhanced optical properties of MoSe₂ grown by molecular beam epitaxy on hBN

C. Vergnaud⁽¹⁾, A. Marty⁽¹⁾, H. Okuno⁽²⁾, Vivekanand Tiwari⁽³⁾, Lei Ren⁽³⁾, Cédric Robert⁽³⁾, Xavier Marie⁽³⁾ and Matthieu Jamet^{(1)*}

⁽¹⁾Univ. Grenoble Alpes, CEA, CNRS, Grenoble INP, IRIG-SPINTEC, 17 Avenue des Martyrs, 38054 Grenoble, France

⁽²⁾ Univ. Grenoble Alpes, CEA, IRIG-MEM, 17 Avenue des Martyrs, 38054 Grenoble, France

⁽³⁾Univ. Toulouse, INSA-CNRS-UPS, LPCNO, 135 Avenue de Rangueil, 31077 Toulouse, France

* celine.vergnaud@cea.fr

Hexagonal boron nitride (hBN) has been identified as a key material to encapsulate 2D materials and enhance their electronic properties such as carrier mobility [1] or photoluminescence [2]. Moreover, for its flatness, inertness and large bandgap, hBN constitutes an ideal substrate for the van der Waals epitaxy of other 2D materials like transition metal dichalcogenides (TMD). It also exhibits a 3-fold symmetry matching the one of TMDs in the 2H phase, which could prevent the formation of twin domains and boundaries. A previous work reported the molecular beam epitaxy (MBE) growth of MoSe₂ monolayers on hBN flakes exfoliated from the bulk crystal. Very narrow photoluminescence lines were obtained demonstrating the ability of MBE to synthesize high quality TMD monolayers with electronic properties comparable to or even better than that of exfoliated TMD flakes [3]. However, in this report, the growth of one MoSe₂ layer required almost 24 hours. The authors alternated growths at 300°C to favour nucleation and annealings at 750°C to improve the crystal quality and prevent the formation of bilayers. In this work, we adopted another growth strategy. The full growth of one MoSe₂ layer on exfoliated hBN flakes was achieved at high temperature (800°C) in order to target both high crystalline quality and a limited formation of bilayers. However, due to the ultralow surface energy of hBN, the nucleation rate is negligible at such high temperature. To circumvent this issue, we started with a nucleation step at 800°C using a very high growth rate. By this, we obtained a reasonable density of nuclei at the hBN surface and we could proceed with the growth of the MoSe₂ monolayer at 800°C using a much lower deposition rate. In our case, the total deposition time did not exceed 2-3 hours and we obtained photoluminescence linewidths in the range 4-5 meV, comparable to the one obtained in [3]. Moreover, we detected a clear photoluminescence signal at room temperature with hBN fully covered by MoSe₂ [4]. This work demonstrates the potential of MBE to grow high quality TMD monolayers on large areas constituting model systems to further study proximity effects.

- [1] A. S. Mayorov, R. V. Gorbachev, S. V. Morozov, L. Britnell, R. Jalil, L. A. Ponomarenko, P. Blake, K. S. Novoselov, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. K. Geim “Micrometer-scale ballistic transport in encapsulated graphene at room temperature” *Nano Lett.*, vol. 11, pp. 2396-2399, 2011.
- [2] F. Cadiz *et al.* Excitonic Linewidth Approaching the Homogeneous Limit in MoS₂-Based van der Waals Heterostructures” *Phys. Rev. X*, vol. 7, pp. 021026, 2017.
- [3] W. Pacuski *et al.* “Narrow excitonic lines and large-scale homogeneity of transition-metal dichalcogenides monolayers grown by molecular beam epitaxy on hexagonal boron nitride” *Nano Lett.*, vol. 20, pp. 3058-3066, 2020.
- [4] C. Vergnaud, A. Marty, H. Okuno, V. Tiwari, L. Ren, C. Robert, X. Marie and M. Jamet, “Enhanced optical properties of MoSe₂ grown by molecular beam epitaxy on hBN” in preparation.

Axe 4: Développements instrumentaux et caractérisations ex- et in-situ

Alexandre ARNOULT, Paola ATKINSON, Patrick LE FÈVRE, Danielle PIERRE

Mercredi 9h-9h30

Characterization of spin-polarized surface states

Nicolas Reyren

Unité Mixte de Physique, CNRS, Thales, Université Paris-Saclay, 91767 Palaiseau, France

Spintronics is based on the spin of the electron rather than its charge. First, polarized charged currents were used, simply polarizing the current passing through a ferromagnetic conductor. Since the late 2000's, it was realized that pure spin currents (without no charge current associated) can be generated from charge currents, the charge to spin conversion being possible through spin-orbit coupling (SOC). The conversion in bulk materials results from spin-dependent scattering or from the peculiar geometry of the band structure. Conversion is also possible at interfaces where the SOC produces Rashba effect, or the surface state of 3D topological insulator. In the interfacial case, the spin to charge conversion results from the spin-momentum locking (in the reciprocal space): a charge current flowing at such interface will produce a spin accumulation, which, in turn, can diffuse in a neighbouring material, effectively producing a transverse spin current. The reciprocal effect exists as well. In this talk, I will review some of the techniques that I used on different systems to characterize these effects. I will start from the less direct one, the electronic magneto-transport with specific magnetoresistance effects, and continue with the so-called FMR-spin pumping. I will then discuss very recent THz emission measurements and finish by the most direct measurements using spin- and angle-resolved photoemission spectroscopy (SARPES).

Mercredi 9h30-9h50

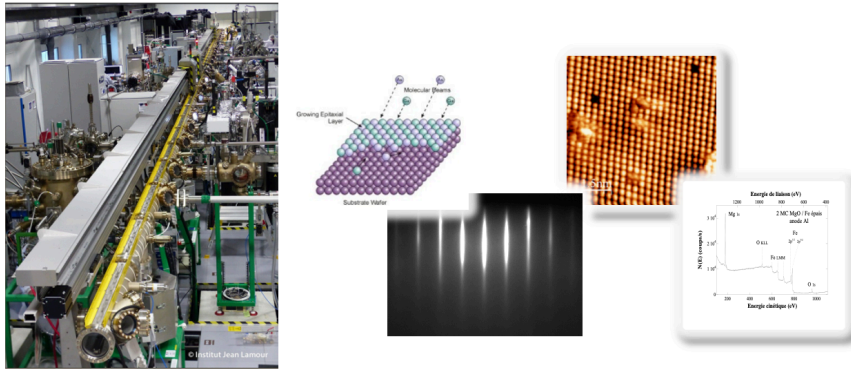
Etudes de nanomatériaux sous UHV : de la croissance multi-matériaux à l'analyse multi-techniques

Danielle Pierre, Alexandre Bouché, Ludovic Pasquier, Maoxiang Zhu, Oleg Kurnosikov, David Pilloud, Yannick Fagot-Revurat, Stéphane Andrieu, Victor Palin, Stéphane Mangin
Institut Jean Lamour, UMR 7198, 2 allée André Guinier, 54000 Nancy

Le Tube-DAUM est un instrument de recherche unique par la diversité des équipements qui le compose. Cette plateforme technologique est constituée d'un tunnel de transfert sous ultravide de 70 mètres de long sur lequel sont connectés une trentaine d'équipements. Ces équipements permettent l'élaboration et la caractérisation de matériaux à l'échelle atomique, en restant sous ultravide tout au long des différentes étapes des projets de recherche.

Ce « cluster » hors normes permet d'une part, de mutualiser des équipements d'analyse (spectroscopies Auger, XPS, et UPS, diffraction électronique, microscopie champ proche, magnétométrie Kerr, photoémission résolue en angle et en spin, ...) et d'autre part, il ouvre des champs de recherche innovants qui nécessitent des empilements et des architectures complexes de matériaux impliquant plusieurs procédés de croissance et de caractérisation.

Dans cet exposé seront présentés succinctement les équipements de la plateforme Daum, les avantages liés au couplage du dépôt et de l'analyse sous ultravide, l'importance de la préparation et de la qualité de surface pour la caractérisation du matériau, ainsi que des exemples de travaux de recherche en cours.



Mercredi 9h50-10h10

Real-time characterization of the UHV growth of MAPbI₃ by Grazing Incidence Fast Atom Diffraction (GIFAD)

A. R. Allouche^{1,4}, E. M. Staicu Casagrande¹, A. Momeni¹, G. Trippé-Allard², D. Garrot³, E. Deleporte², H. Khemliche^{1*}

¹ ISMO, Université Paris-Saclay, CNRS, Orsay, France

² LuMIn, Université Paris-Saclay, ENS Paris-Saclay, CNRS, CentraleSupélec, Orsay, France

³ GEMAC, Université Paris-Saclay, UVSQ, CNRS, Versailles, France ⁴ Laboratoire de Physique et Modélisation, EDST, Lebanese University, Tripoli, Lebanon

* hocine.khemliche@universite-paris-saclay.fr

Hybrid perovskites layers gathered significant attention in recent years owing to their remarkable optoelectronic properties. However, their application on a large scale is limited by several issues, including (i) their degradation caused by environmental interactions (light, humidity, etc.), and (iii) the difficulty of producing high quality layers on a large area. Deposition by vacuum evaporation may contribute to solve some of the issues mentioned above¹. Although this method indeed offers a better control of the layer quality and thickness compared to the more popular solution processing, the growth process inherently produces a PbI₂ rich interface with the substrate², which increases the recombination rate. The challenge then consists in developing a non-destructive method that allows a more complete control of the interface and the subsequent growing layers on the atomic scale.

Grazing Incidence Fast Atom Diffraction (GIFAD), a novel characterization technique that exploits the quantum scattering of He atoms at keV energies, enables real-time characterization of a growing layer³. GIFAD provides a direct information on the organization dynamics by resolving the evolution of electron density profile of the very top layer⁴. The latter can then be related to atomic positions within the unit cell. Because GIFAD is absolutely non-destructive, it is possible to monitor the growth of very fragile materials, such as MAPbI₃, over long periods.

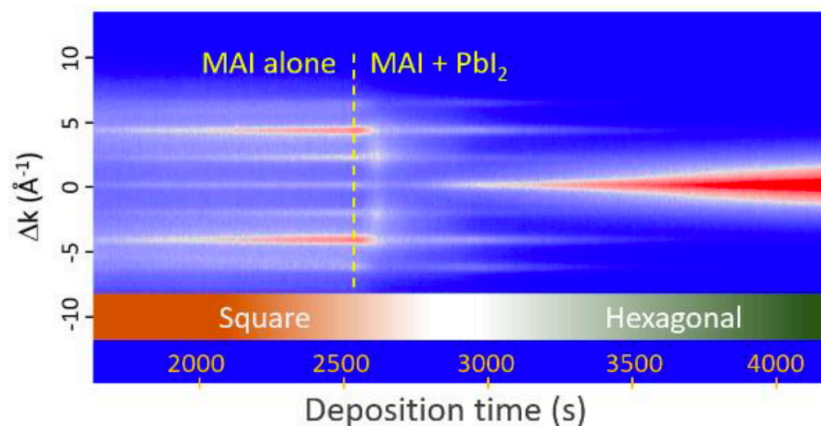


Fig. 1 : Evolution of the GIFAD pattern during codeposition of MAI+PbI₂ on a MAI buffer layer/Ag(100).

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

Figure 1 shows the time evolution of the diffraction pattern when the MAPbI₃ components are codeposited on a MAI/Ag(100) buffer layer. Codeposition of both PbI₂ and MAI produces a sharp transition to a strained new square structure that eventually evolves to a PbI₂ rich hexagonal lattice. Evolution of the relative intensities of the diffraction peaks reveals that the fading structure, beyond the sharp transition, is not simply being covered by a PbI₂ hexagonal layer. Rather, it continuously evolves with time through changes in its atomic positions (displacive transformation); this dynamics should provide valuable information of the building-up of the MAPbI₃ layer. Subsequent growth proceeds layer-by-layer with non-equivalent planes and lattice parameter relaxation.

- 1 Liu, M., Johnston, M. & Snaith, Nature 501, 395 (2013). <https://doi.org/10.1038/nature12509>
- 2 Haitao Xu et al., Organic Electronics 69, 329 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.orgel.2019.03.047>
- 3 P. Atkinson et al.; Appl. Phys. Lett. 105, 021602 (2014) <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.155308>
- 4 H. Khemliche et al.; Appl. Phys. Lett. 95, 151901 (2009) <https://doi.org/10.1063/1.3246162>

Mercredi 10h10-10h30

Hétérostructures TMD/Ferroélectrique – Influence de la polarisation du ferroélectrique sur la structure électronique du TMD

Raphaël Salazar¹, Sara Varotto², Céline Vergnaud³, Vincent Garcia², Stéphane Fusil², Julien Chaste⁴, Thomas Maroutian⁴, Alain Marty³, Frédéric Bonell, Debora Pierucci⁵, Abdelkarim Ouerghi⁴, François Bertran¹, Matthieu Jamet³, Manuel Bibes², Julien Rault¹, Jan Minar⁶ et Patrick Le Fèvre¹

¹*Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Départementale 128, F-91190 Saint-Aubin, France*

²*Unité Mixte de Physique, CNRS, Thales, Université Paris-Saclay, 1 avenue Augustin Fresnel, 91767 Palaiseau, France*

³*Université Grenoble Alpes, CEA, CNRS, Grenoble INP, IRIG-SPINTEC, 38000 Grenoble, France*

⁴*Université Paris-Saclay, CNRS, Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies, 91120 Palaiseau, France*

⁵*Institut des NanoSciences de Paris, Sorbonne Université, 4 place Jussieu, boîte courrier 840, 75252 Paris Cedex 05, France*

⁶*University of West Bohemia, Pilsen, Czech Republic*

Les dichalcogénures de métaux de transition (TMD) sont des matériaux lamellaires. La brique de base est un feuillet de formule générique MX₂, où M est un élément de transition et X un chalcogène (M = Mo, W...; X = S, Se, Te...), liés entre eux par des liaisons covalentes. Le solide tridimensionnel est ensuite obtenu en empilant ces couches MX₂, faiblement liées entre elles par des interactions de type van der Waals. Des films de WSe₂ ont été préparés par épitaxie par jet moléculaire (MBE) puis transférés sur un ferroélectrique, BiFeO₃. Ce ferroélectrique est lui-même épitaxié sur un substrat de DyScO₃(110) mais sur des buffers permettant, d'ajuster la direction de sa polarisation électrique : avec un buffer de SrRuO₃ la polarisation est perpendiculaire à la couche et pointe vers le substrat (configuration DOWN), tandis que sur un buffer de La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃, la polarisation pointe dans la direction opposée (configuration UP). Grâce à la photoémission résolue en angle (ARPES), nous avons mis en évidence un décalage en énergie de liaison de la structure électronique avec l'inversion de la polarisation. Pour 3 et 2 couches de WSe₂, les décalages sont respectivement de 750 meV et 640 meV. Ces résultats démontrent bien, qu'en jouant sur cette polarisation, il est possible d'influer notablement sur la structure électronique de WSe₂, pour obtenir deux états qui pourraient être facilement différenciés par la conductivité électrique de l'empilement. Enfin, sur des couches de WSe₂ épitaxiées par MBE sur du graphène, nous avons pu décrire par ARPES la transition de la structure électronique de 2D à 3D lorsque l'épaisseur de TMD augmente. Aux faibles épaisseurs (entre 1 et 3 couches), seuls quelques états électroniques discrets apparaissent à certaines valeurs de k_z (composante du vecteur d'onde perpendiculaire aux couches) dans l'espace réciproque. Au fur et à mesure que l'épaisseur augmente, ces états se multiplient pour commencer à former une dispersion continue. Ces résultats sont très bien reproduits par des calculs de la fonction spectrale dans un modèle à une étape.

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

Mercredi 10h30-10h50

The EpiCentre joint laboratory between LAAS-CNRS and RIBER: real-time characterization instruments and scientific objectives

Alexandre Arnoult¹

¹ LAAS-CNRS, Université de Toulouse, CNRS, Toulouse, France
aarnoult@laas.fr

Mercredi 11h20-15h

Axe 5 : Épitaxie de nanostructures et de nouveaux systèmes

Yamina ANDRÉ, Stefano CURIOTTO, Ludovic DESPLANQUE, Amélie DUSSAIGNE, Sébastien PLISSARD

Mercredi 11h20-11h50

Selective area growth of well-ordered (In,Ga)N nanowires grown by HVPE

Geoffrey Avit¹, Elias Semlali¹, Jihen Jridi¹, Mohammed Zeghouane¹, Yamina André¹, Evelyne Gil¹, Catherine Bougerol², V. G. Dubrovskii³, Philip Shields⁴ and Agnès Trassoudaine¹

¹Université. Clermont Auvergne, CNRS, SIGMA Clermont, Institut Pascal, F-63000 Clermont-Ferrand, France

²CNRS, Institut Néel, F-38042 Grenoble, France

³Faculty of Physics, St. Petersburg State University, St. Petersburg, Russia

⁴[Department of Electronic & Electrical Engineering, University of Bath, England](#)

* geoffrey.avit@uca.fr

InGaN material is extensively studied for high performance optoelectronic devices due to its tunable bandgap from IR to UV by varying the indium mole fraction in the alloy. However, the growth of InGaN with high indium concentration that is needed for applications such as monolithic RGB LEDs, remains a challenge. It could be overcome thanks to the nanowire geometry that enables the growth of indium-rich InGaN material with a low density of defects on different substrates. In this context, we show that hydride vapor phase epitaxy (HVPE) has unique features regarding the growth of InGaN nanowires [1,2].

The full range of indium composition is achieved by controlling the input partial pressures of group-III elements (InCl₃ and GaCl) and the growth temperature. Thanks to the use of chloride precursors, selective area growth (SAG) of InGaN nanowires with an In composition ranging from 0 to 100% is also outstandingly achieved. X-Rays diffraction and high-resolution transmission electron microscopy are used to determine the composition and the crystalline structure of the nanowires. Energy dispersive spectroscopy profiles on single InGaN nanowires is used to probe In segregation in the wires. Photoluminescence measurements at low temperature are performed to investigate the optical properties of the nanowires.

The experimental results of the systematic studies are supported by a phenomenological model which attributes the wide compositional range of InGaN nanowires within the bulk miscibility gap to a purely kinetic growth regime without macroscopic nucleation.

These findings provide a convenient method to grow homogenous InGaN nanowires and could push forward the performances of optoelectronic devices.

[1] Zeghouane M, Avit G, Cornelius T W, André Y, Bougerol, C, Taliércio T, Ferret P, Gil E, Tournié E, Thomas O, Trassoudaine A. *CrystEngComm*, 2019, 21, 2702-2708



Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

[2] Zeghouane M, Avit G, André Y, Taliercio T, Ferret P, Gil E, Castelluci D, Disseix P, Leymarie J, Tournié E, Trassoudaine A. *Cryst. Growth Des.* 2020, 20, 4, 2232–2239

Mercredi 11h50-12h10

Réalisation de nanostructures HgTe/CdTe (001) par épitaxie sélective

Nicolas Chaize^{1*}, Xavier Baudry¹, Pierre-Henri Jouneau², Eric Gautier², Yves Deblock³, Bruno Grandidier³, Denis Mariolle¹, Ludovic Desplanque³, Hermann Sellier⁴ et Philippe Ballet¹

1 CEA, LETI, Univ. Grenoble Alpes, 38000 Grenoble, France

2 Univ. Grenoble Alpes, CEA, INAC-MEM, 38000 Grenoble, France

3 Univ. Lille, CNRS, Centrale Lille, ISEN, Univ. Valenciennes, UMR 8520–IEMN, F-59000 Lille, France

4 Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Institut Néel, 38000 Grenoble, France

* nicolas.chaize@cea.fr

Les systèmes topologiquement protégés pourraient être la solution à l'électronique quantique de demain [1]. Ils nécessitent des matériaux aux propriétés particulières (fort couplage spin-orbite, grande mobilité des électrons, ...) ainsi que la réalisation de nano-circuits complexes où les matériaux présentent une qualité cristalline et une pureté élevées [2]. L'épitaxie sélective par jets moléculaires sur substrat masqué (SiO₂) apparaît alors comme une méthode prometteuse pour la réalisation de telles nanostructures par rapport à des techniques de croissance Vapeur-Liquide-Solide (VLS) [3]. Le caractère isolant topologique de HgTe/CdTe [4] en ferait un candidat idéal, mais l'épitaxie sélective HgTe n'a encore jamais été démontrée.

La réalisation de nanostructures HgTe propices à des expériences de transport électronique requiert d'optimiser la croissance en favorisant la sélectivité et la qualité cristalline des nanostructures. Il s'agit donc d'identifier les paramètres de croissance sur lesquels s'appuyer pour obtenir les résultats voulus. Une bonne maîtrise des conditions d'épitaxie est également nécessaire pour garantir la reproductibilité des résultats.

Le mécanisme d'épitaxie est ainsi étudié en faisant varier les paramètres de croissance : vitesse de dépôt (GR), température (GT), épaisseur de dépôt. Des lignes de largeur variable orientées selon les différentes directions cristallines du plan ([100], [110] ou [1-10]) ainsi que des motifs circulaires (anneaux) sont examinés. Les structures sont analysées par microscopie électronique à balayage (MEB), par microscopie à force atomique (AFM) et par microscopie électronique en transmission à balayage (STEM).

En abaissant la vitesse de croissance sous 1 ML/s, l'adsorption des adatoms de tellure sur les surfaces masquées est empêchée et le dépôt est limité aux parties libres du masque avec de légères surcroissances latérales comme présenté sur la Figure 1. La longueur caractéristique de diffusion des atomes de tellure sur le masque est alors comprise entre 100 et 225 nm. Selon la forme des ouvertures ou leur orientation cristalline, la surcroissance latérale est de forme différente (facettes, super-élévations). Les premiers stades de croissance dans les ouvertures sont caractérisés par la formation d'îlots le plus souvent collés au masque. Néanmoins à partir d'une certaine épaisseur, on retrouve une structure complète présentant des terrasses atomiques comparable à une croissance 2D. Des fils longs de quelques micromètres et de 150 nm de large (pour une ouverture de 50 nm) sont ainsi réalisés ainsi que des structures plus complexes comme des grilles ou des réseaux alvéolés.

Cette étude s'inscrit dans le projet INSPIRING (ANR-21-CE09-0026-01) financé par l'agence nationale pour la recherche (ANR).

[1] S. Das Sarma, M. Freedman, and C. Nayak, "Majorana zero modes and topological quantum computation," *npj Quantum Inf.*, vol. 1, no. 1, 2015, doi: 10.1038/NPJQI.2015.1.

[2] N. P. de Leon *et al.*, "Materials challenges and opportunities for quantum computing hardware," *Science* (80-), vol. 372, no. 6539, 2021, doi: 10.1126/science.abb2823.

[3] D. Car, J. Wang, M. A. Verheijen, E. P. A. M. Bakkers, and S. R. Plissard, "Rationally designed single-crystalline nanowire networks," *Adv. Mater.*, vol. 26, no. 28, pp. 4875–4879, 2014, doi: 10.1002/adma.201400924.

[4] P. Ballet *et al.*, "MBE growth of strained HgTe/CdTe topological insulator structures," *J. Electron. Mater.*, vol. 43, no. 8, pp. 2955–2962, 2014, doi: 10.1007/s11664-014-3160-z.

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

Mercredi 12h10-12h40

Nanodomains ferroélectriques dans GeTe épitaxié sur Si(111)

Boris Croes,¹ Fabien Cheynis,¹ Yide Zhang,² Cédric Voulot,² Kokou Dodzi Dorkenoo,² Salia Cherifi-Hertel,² Cristian Mocuta,³ Michaël Texier,⁴ Thomas Cornelius,⁴ Olivier Thomas,⁴ Marie-Ingrid Richard,⁵ Pierre Müller,¹ Stefano Curiotto,¹ and Frédéric Leroy¹

¹Aix Marseille Univ, CNRS, CINAM, AMUTECH, Marseille, France,

²Université de Strasbourg, CNRS, IPCMS, Strasbourg, 67000, France,

³Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, St Aubin, France,

⁴Aix Marseille Univ, Univ Toulon, IM2NP, AMUTECH, Marseille, France,

⁵Univ Grenoble Alpes, CEA Grenoble, IRIG, MEM, NRS, Grenoble, France

* frederic.leroy.3@univ-amu.fr

Parmi les ferroélectriques, une nouvelle classe de matériaux pour la spintronique a récemment été introduite : les semi-conducteurs ferroélectriques à effet Rashba [1]. Les principaux résultats, obtenus sur des films minces de GeTe, ont démontré que le retournement de la polarisation ferroélectrique conduit à un changement de la chiralité en spin de la structure de bande [2,3]. Une conversion « spin to charge » a également été mise en évidence à température ambiante dans des structures ferromagnétique-GeTe [4-6].

Dans cette présentation, j'aborderai l'organisation des nanodomains ferroélectriques présents dans les films minces de GeTe réalisés sur Si(111) [7], le type de paroi de domaine et la structure de l'interface avec le substrat. Des films minces de GeTe quasi-monocristallins peuvent être réalisés sur Si(111) par épitaxie par jet moléculaire en déposant au préalable une monocouche atomique de Sb [8-10]. Ce substrat permet d'étudier et de contrôler les domaines ferroélectriques car ils ne sont pas limités par les joints de grains. La fraction volumique des nanodomains ferroélectriques et la taille des domaines ont été mesurées par diffraction des rayons X et microscopie à électron lent (LEEM) dans une large gamme d'épaisseur de film (10-1800 nm). La microscopie par génération de seconde harmonique (SHG) combinée à une analyse polarimétrique révèle la symétrie locale de ces domaines. En utilisant la microscopie électronique à transmission à haute résolution (HR-TEM), nous montrons que les parois de domaines sont à 71° et que l'interface GeTe/Si est stabilisée par des dislocations qui relaxent l'important désaccord paramétrique entre les deux réseaux cristallins. L'apparition/disparition réversible des nanodomains ferroélectriques par cyclage thermique, visualisée par LEEM *in situ*, est attribuée aux contraintes thermiques induites par le différentiel d'expansion thermique entre les deux matériaux.

[1] D. Di Sante et al., Adv. Mater. 2013, 25, 509.

[2] C. Rinaldi et al., Nano Lett., 2018, 18, 2751.

[3] J. Krempasky et al., Phys. Rev. X, 2018 8, 021067.

[4] C. Rinaldi et al., APL Mater., 2016, 4, 032501.

[5] J. Slawinska et al., Phys. Rev. B., 2019, 99, 075306.

[6] S. Varotto et al., Nature Electronics, 2021, 4, 740

[7] B. Croes et al., Phys. Rev. Materials, 2021, 5, 124415.

[8] R. Wang et al., J. Phys. Chem. C, 2014 118, 29724.

[9] B. Croes et al., Phys. Rev. Materials, 2022, 6, 064407.

[10] B. Croes et al., Phys. Rev. Materials, 2023, 7, 014409.

Mercredi 14h-14h20

Etude des propriétés de films minces de Nitrure de Niobium épitaxiés par EJM sur substrat silicium via un buffer (Al, Ga)N.

A. Pedeches^{1*}, H. Rotella¹, M-P. Chauvat², M. Morales², P. Ruterana², S. L. Delage³, N. Michel³, and F. Semond¹

¹Université Côte d'Azur, CNRS, CRHEA, rue Bernard Grégory, 06905 Sophia Antipolis, France

²CIMAP, UMR 6252 CNRS, 6 Bd Maréchal Juin, 14050 Caen, France

³III-V Lab, 91767 Palaiseau, France

*email: antoine.pedeches@crhea.cnrs.fr

Le NbN est un matériau métallique à température ambiante devenant supraconducteur en dessous de 17 K [1]. Des études récentes montrent que les matériaux III-N (Al, Ga, In)-N peuvent être épitaxiés sur le NbN et que les



Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

films minces de NbN peuvent également être épitaxiés sur les matériaux III-N [2-4]. La combinaison de ces matériaux permet la fabrication de structures hybrides semi-conducteur/métal et semi-conducteur/supraconducteur. Ces hétérostructures hybrides fascinantes ouvrent des perspectives très intéressantes pour la démonstration de dispositifs électroniques fonctionnant à très haute fréquence, ainsi que dans le domaine des technologies quantiques avec par exemple les nanofils supraconducteurs pour la détection de photons uniques et les qubits supraconducteurs.

Ce travail présente une étude de la croissance par EJM d'hétérostructures III-N/NbN/III-N sur des substrats de silicium. En explorant une large gamme de températures de croissance allant de 750°C à 1100°C et en faisant varier le rapport de flux NH₃/Nb, différentes phases NbN sont obtenues (δ -NbN (cubique), ϵ -NbN (hexagonale) et β -Nb₂N (hexagonale)). La diffraction d'électrons par réflexion à haute énergie (RHEED) permet d'observer in-situ les modifications de la phase NbN au cours de la croissance. La microscopie à force atomique (AFM) est utilisée pour identifier les morphologies de surface spécifiques des différentes phases. Les différentes phases de NbN sont identifiées à l'aide de la diffraction des rayons X combinée à la microscopie électronique à transmission. Des mesures de transport sont également effectuées pour établir des corrélations entre les propriétés structurales et électroniques.

Des hétérostructures III-N/NbN/III-N sont épitaxiées sur substrat silicium afin d'étudier la qualité des interfaces. Les études TEM montrent des interfaces abruptes et que le GaN épitaxié sur NbN possède la polarité azote. Ces résultats encourageants indiquent qu'il est possible avec cette famille de matériaux nitrures d'épitaxier des hétérostructures hybrides semiconducteur/supraconducteur et semiconducteur/métal.

- [1] Y. M. Shy et al., Journal of Applied Physics 44, 5539 (1973).
- [2] D. S. Katzer, et al., Appl. Phys. Exp. 8, 085501 (2015).
- [3] A. Kobayashi et al., Applied Physics Express 13, 061006 (2020).
- [4] P. Dang et al., Science Advances 7(8), eabf 1388 (2021).

Mercredi 14h20-14h40

Two step growth procedure for homogeneous GaN NW arrays on graphene

Dyhia TAMSAOUT¹, Ali MADOURI¹, Camille BARBIER¹, Christophe DURAND², Jonathan HENRIQUES², Noëlle GOGNEAU¹, Edmond CAMBRIL¹, Jean René COUDEVYLLE¹, Ludovic LARGEAU¹, Agnès TRASSOUDAIN³, Elias SEMLALI³, Maria TCHERNYCHEVA¹ and Jean-Christophe HARMAND¹

1: Center for Nanoscience and Nanotechnology, CNRS, Université Paris-Saclay, France

2: Université Grenoble Alpes, CEA, IRIG, 17 avenue des Martyrs, 38000 Grenoble, France

3: Université Clermont Auvergne, Institut Pascal, 4 av Blaise Pascal, 63170 Aubière, France

email : dyhia.tamsaout@c2n.upsaclay.fr

Nanowires (NW) are promising candidates for the development of flexible optoelectronic devices, such as LEDs. With this objective, we have investigated the epitaxial growth of GaN nanowires (NWs) on graphene. First, we transferred CVD-grown graphene onto SiO₂/Si. We will present the transfer conditions that we optimized to achieve a clean surface. Then, the GaN NW growth will be described. We use a growth temperature of 815 °C which enables selectivity, *i.e.* GaN NWs grow on graphene but not on SiO₂ (Fig. 1a). It is observed that nucleation occurs after a long incubation time (90 minutes). This long delay is not favorable for industrial production. The incubation time can be reduced by changing the growth conditions. In particular, it reduces to 35 minutes with high Ga and N fluxes. However, this method causes a large consumption of Ga which is re-emitted in the MBE reactor. Another method is to reduce the substrate temperature. However, a drop of more than 10°C leads to the loss of selectivity. Therefore, we developed a two-step growth method which allowed us first to significantly reduce the incubation time down to 25 minutes (first step at 795 °C) and then to keep the selectivity while GaN NWs elongate (second step at 835°C). This process results in a very good NW length homogeneity, as shown in Fig. 1b. Given these encouraging results, we will apply this method on patterned graphene substrates to obtain a set of homogeneous GaN nanowires that will be used as seeds to form GaN micro-domains by lateral re-growth. Preliminary results showing that such micro-domains can be obtained by MOVPE or HVPE are shown in Fig. 1c and Fig. 1d. They will be used as transferrable micro-substrates to fabricate GaN-based LEDs.

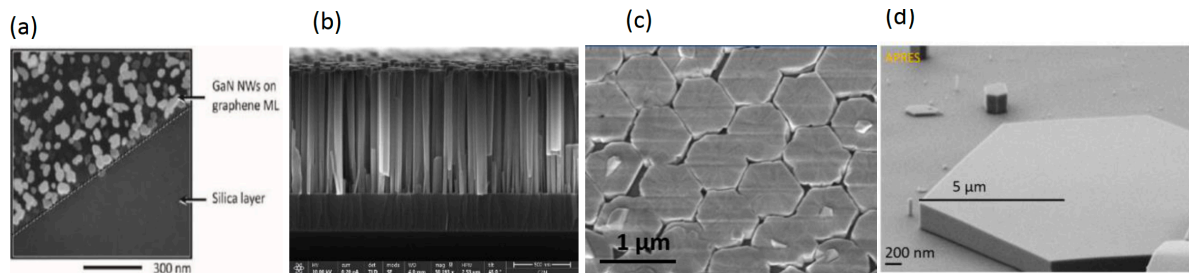


Figure 1: Selective growth of GaN NWs on graphene by MBE: (a) –top view at the edge of a graphene patch; (b) – SEM image of GaN NWs grown with 2 steps growth (795°C- 835°C); (c) – Organized GaN micro-domains obtained by MOCVD on MBE GaN NWs patterned; (d) GaN micro-domain obtained by HVPE on self-assembled NW

Mercredi 14h40-15h

Croissance de micro-domaines GaN organisés sur graphène

Jonathan Henriques^{1*}, Dyhia Tamsaout², Ludovic Largeau², Edmond Cambri², Maria Tchernycheva², Joël Eymery³, Jean-Christophe Harmand², Christophe Durand¹

1 Université Grenoble Alpes, CEA, IRIG, PHELIQS, NPSC, 38000 Grenoble, France

2 Centre de Nanoscience et Nanotechnologie (C2N), CNRS, Université Paris-Saclay, 91120 Palaiseau, France

3 Université Grenoble Alpes, CEA, IRIG, MEM, NRS, 38000 Grenoble, France

* jonathan.henriques@cea.fr

Le développement industriel des μ LED est en plein essor. L'ajout d'une flexibilité permettrait d'élargir leurs gammes d'applications aux écrans flexibles. L'utilisation des matériaux 2D tel que le graphène est prometteur pour détacher ces microstructures de leurs substrats grâce aux liaisons faibles van der Waals. Cependant, la faible énergie de surface et l'absence de liaisons pendantes rendent difficile la nucléation/croissance du GaN sur le graph.ne. Récemment, la croissance sélective de nanofils GaN par MBE a été démontrée sur des plots organisés de graph.ne (Gr) sur substrats SiO₂/Si.[1] Dans ce contexte, nous étudions la reprise de croissance sélective par MOCVD en partant de ces nanofils MBE pour obtenir des micro-domaines organisés de GaN sur graph.ne. Des études préliminaires ont permis d'optimiser les conditions pour favoriser une croissance latérale. Ces conditions ont été appliquées sur des plots de graphène organisés d'espacements et de rayons variables où le nombre de nanofils GaN augmente avec le rayon. Nous observons bien une croissance sélective et préférentielle sur les nanofils MBE qui servent de centres de nucléation. Pour les plus grands rayons (250 nm), la morphologie hexagonale des microdomaines est perturbée, sauf dans le cas des faibles espacements (< 250 nm). Ce phénomène est attribué à des nucléations aléatoires sur les différents nanofils présents qui favorisent la sélectivité de croissance, mais génèrent une coalescence non-uniforme. Au contraire, pour les plus petits rayons (<125 nm), des structures hexagonales et planes sont obtenues avec une moindre sélectivité. Dans ce cas, seulement quelques fils participent à la nucléation favorisant la croissance de microdomaines homogènes. Les mesures optiques hyperspectrales par cathodoluminescence des microdomaines montrent une plus grande intensité d'émission du GaN sur les bords, ce qui est cohérent avec une qualité cristalline dégradée au centre des microdomaines en lien avec la coalescence. Ces micro-domaines sont des candidats prometteurs pour la croissance de puits quantiques pour le développement de μ LED flexibles.

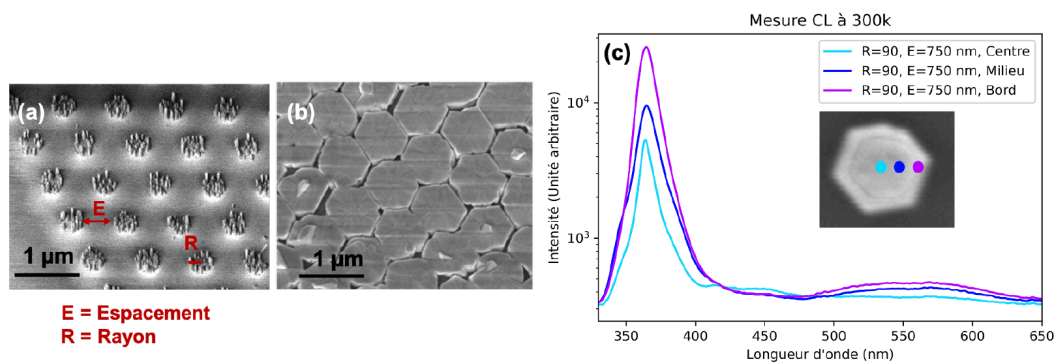


Figure 1 (a) NFs sur graphène organisés sur SiO₂/Si ; (b) Croissance latérale du GaN sur ces NFs par MOCVD ; (c) Mesure de cathodoluminescence à 300 K pour différents endroits d'un micro-domaine.

[1] M. Morassi et al., . Selective Area Growth of GaN Nanowires on Graphene Nanodots ., Cryst. Growth Des., vol. 20, no 2, p. 552-559, f.vr. 2020, doi: 10.1021/acs.cgd.9b00556.

Axe 6 : Couplage épitaxie / propriétés

Benjamin DAMILANO, Noëlle GOGNEAU, Lisa MICHEZ

Mercredi 15h-15h30

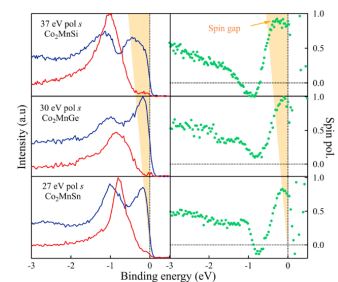
Experimental Study of Half-Metal Magnets Co_2MnZ Heusler Epitaxial Films and Related Super-LatticesC. Guillemard^{1*}, V. Palin², C. De Melo², J. Ghanbaja², P. Le Fevre³, P. Gargiani⁴, M. Valvidares⁴, F. Bertran³ and S. Andrieu²¹CINaM, CNRS – Aix-Marseille Université, Marseille, France²Institut Jean Lamour, CNRS - Université de Lorraine, Nancy, France³SOLEIL synchrotron source, Saint-Aubin, France⁴ALBA Synchrotron Light Source, Cerdanyola del Vallès, Spain

*charles.guillemard@cnrs.fr

The discovery of magnetization reversal by spin-orbit and spin-transfer torques [1,2] as well as the development of spin waves-based devices have placed the spin polarization of conducting electrons, Gilbert magnetic damping coefficient and *Perpendicular Magnetic Anisotropy* (PMA) as key parameters to control for future data storage and information processing technologies. A class of materials called *Half Metal Magnets* (HMM) in theory satisfies most of the aforementioned requirements: HMM compounds are metallic for majority spins and insulator for minority spins [3] which offers the ability to generate or filter fully spin-polarized currents along with a reduced Gilbert damping parameter.

In a first part, I will present the elaboration by molecular beam epitaxy of Co_2MnZ ($Z=\text{Al, Si, Ga, Ge, Sn}$ and Sb) Heusler epitaxial films that are predicted HMM [4]. After a thorough structural study, their HMM behavior will be demonstrated by using Spin-Resolved Photoemission Spectroscopy performed at Cassiopée beamline (SOLEIL synchrotron), where important parameters such as the width of the minority-spin band gap, Fermi energy position in the gap, and spin polarization can be tuned according to the Z element [5,6]. In a second step, the consequence of this peculiar electronic structure on the magnetization dynamics is analyzed by broadband ferromagnetic resonance. Particularly, Gilbert damping coefficients as low as $\alpha = 4.6 \times 10^{-4}$ are obtained and confirm the associated reduction of spin-flip scattering processes of conduction electrons in HMM compounds, therefore demonstrating the high potential of Co_2MnZ compounds for spintronic applications and spin-wave based devices.

In a second part, I will focus on the realization and characterization of $\text{Co}_2\text{MnZ}/\text{Mn}_3\text{G}$ ($G=\text{Ga, Ge}$) super-lattices as promising systems to combine HMM properties and PMA, owing to the strong magnetocrystalline anisotropy of tetragonal Mn_3G ferrimagnetic compounds [7]. In particular, an X-ray Magnetic Circular Dichroism study conducted at Boreas beamline (ALBA synchrotron) will be presented, showing that PMA is achieved and that the magnetic properties can be tuned according to the thicknesses of the sublayers. This unique epitaxially-engineered system paves the way toward high efficiency spintronic devices.

[1] J. C. Slonczewski, *J. Magn. Magn. Mater.* **159**, L1 (1996).[2] A. Chernyshov *et al.*, *Nat. Phys.* **5**, 656 (2009).[3] R. A. de Groot *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **50**, 2024 (1983).[4] I. Galanakis, P. H. Dederichs, and N. Papanikolaou, *Phys. Rev. B* **66**, 174429 (2002).[5] S. Andrieu *et al.*, *Phys. Rev. B* **93**, 094417 (2016).[6] C. Guillemard *et al.*, *Phys. Rev. Appl.* **11**, 064009 (2019).[7] L. Wollmann *et al.*, *Phys. Rev. B* **92**, 064417 (2015).

Growth, structure and magnetic properties of CoNi-SrTiO₃ vertically self-assembled epitaxial nanostructures

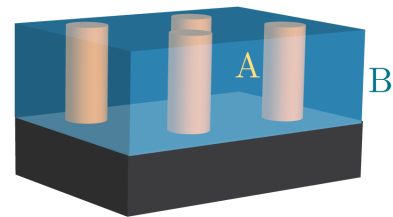
Marcel Hennes¹, Dominique Demaille¹, Yunlin Zheng¹, Franck Vidal^{1*}

¹ Institut des NanoSciences de Paris, Sorbonne Université, CNRS UMR7588

* franck.vidal@sorbonne-universite.fr

Self-assembled vertically aligned nanocomposites (VANs) have recently emerged as a novel playground for strain engineering of physical properties in nanostructures. In contrast to thin films obtained by classical planar heteroepitaxy, VANs consist of two (or more) intertwined phases, coupled along vertical interfaces (as illustrated in the Figure, in the case of a two-phases A-B composite). Their unique nanoarchitecture, which can be tuned by choosing appropriate growth conditions, results in deformations that cannot be easily attained in traditional flat geometries [1].

In this contribution, we will show how nanometer-sized acicular inclusions of magnetic 3d metals in various oxide host matrices can be obtained via sequential pulsed laser deposition [2]. We will then present experimental results on the strain state of the VANs, obtained by x-ray diffraction and transmission electron microscopy, and discuss the mechanisms involved in the relaxation of strain in VANs [3-4]. We will demonstrate how the magnetic properties of the thin films can be controlled accurately by relying on the strain applied along the backbone of the nanowires [5-6].



[1] M. Hennes, D. Demaille, G. Patriarche, T. Tran, Y. Zheng, F. Vidal, Strain, magnetic anisotropy, and composition modulation in hybrid metal-oxide vertically assembled nanocomposites, MRS Bulletin 46, 136 (2021)

[2] M. Hennes, V. Schuler, X. Weng, J. Buchwald, D. Demaille, Y. Zheng, F. Vidal, Growth of vertically aligned nanowires in metal-oxide nanocomposites: kinetic Monte-Carlo modeling versus experiments, Nanoscale 10, 7666 (2018)

[3] X. Weng, M. Hennes, A. Coati, A. Vlad, Y. Garreau, M. Sauvage-Simkin, E. Fonda, G. Patriarche, D. Demaille, F. Vidal, Y. Zheng, Ultrathin Ni nanowires embedded in SrTiO₃: Vertical epitaxy, strain relaxation mechanisms, and solid-state amorphization, Physical Review Materials 2, 106003 (2018)

[4] X. Weng, M. Hennes, T. Tran, N. Casaretto, D. Demaille, F. Vidal, Y. Zheng, Orientation and lattice matching of CoNi nanowires embedded in SrTiO₃: unveiling novel strain relaxation mechanisms in vertically aligned nanocomposites, CrystEngComm, 22, 4730 (2020)

[5] G. Radtke, M. Hennes, M. Bugnet, Q. Ramasse, X. Weng, D. Demaille, B. Gobaut, P. Ohresser, E. Otero, F. Choueikani, A. Juhin, Ph. Sainctavit, Y. Zheng, F. Vidal, Atomic-Scale Study of Metal-Oxide Interfaces and Magnetoelastic Coupling in Self-Assembled Epitaxial Vertically Aligned Magnetic Nanocomposites, Advanced Materials Interfaces 1900549 (2019)

[6] X. Weng, M. Hennes, A. Juhin, Ph. Sainctavit, B. Gobaut, E. Otero, F. Choueikani, P. Ohresser, T. Tran, D. Hrabovskiy, D. Demaille, Y. Zheng, F. Vidal, Strain-engineering of magnetic anisotropy in Co_xNi_{1-x}-SrTiO₃/SrTiO₃(001) vertically assembled nanocomposites, Physical Review Materials 6, 046001 (2022)

Jeudi 9h-9h20

Intégration par SAG de plusieurs lasers SIBH-DFB optimisée sur une plage >100 nm dans la bande O

G. Afonso^{1,2}, G. Cerulo¹, N. Vaissiere¹, V. Vakarin¹, A. Elias¹, C. Fortin¹, J-F. Paret¹, D. Lanteri¹, K. Mekhazni¹, F. Pommereau¹, and J. Decobert¹

¹ III-V Lab, Palaiseau, France

² Université Grenoble Alpes, École doctorale EEATS, Grenoble, France

L'augmentation de la demande dans les réseaux optiques combinée à de nouveaux types d'applications mène à une nécessité d'augmenter les vitesses tout en diminuant le coût et la consommation. Les Circuits Photoniques Intégrés (PICs) sur les plateformes InP sont des éléments clés pour réaliser les prochaines générations d'émetteurs-récepteurs compacts et à faible coût^[1]. Dans cette présentation, nous discuterons l'introduction de la Croissance Sélective (SAG)^[2] pour augmenter les capacités d'intégration sur une plateforme PIC établie. Afin de

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

démontrer l'impact sur la qualité du matériau épitaxié avec cette approche, nous montrons la performance des lasers à rétroaction distribuée (DFB), basés sur des Multi-puits quantiques (MQWs) en AlGaInAs, optimisés par SAG.

Pour démontrer l'intégration de différentes régions actives par SAG, une structure de MQWs en AlGaInAs a été crue sur un substrat InP:n (100) avec des masques diélectriques SiO₂ de différentes largeurs (W_m). La microdiffraction des rayons-X (μXRD) utilisant une taille de spot à 50x500 μm² a été utilisée pour estimer avec précision l'augmentation en épaisseur des puits et des barrières, due à l'effet d'augmentation du taux de croissance (GRE) induit par l'effet SAG. L'augmentation de l'épaisseur cause un *redshift* de l'émission des MQWs dû à la diminution en énergie associée à la transition électron → trou lourd. Avec une description précise du comportement du GRE en fonction de la géométrie des masques, nous avons conçu et réalisé des lasers DFB basés sur des régions MQW, en adaptant la position du pic de Photoluminescence (PL) avec le SAG. Les lasers de 500μm de long ont un traitement antireflet sur les deux extrémités.

La figure 1 montre les observations MEB sur la zone des MQWs à la fin du procès qui confirme le GRE dans la gamme estimée par μXRD. Les conditions de croissance sont optimisées pour obtenir la GRE pour les régions MQW, tout en la limitant sur les couches de contact p, n et de réseau d'une technologie de rubans enterrés (SIBH) en deux étapes [3]. Pour évaluer l'impact de l'augmentation d'épaisseur et du potentiel changement de composition locale dans les zones SAG, des réseaux de Bragg ont été définis pour chaque groupe de DFBs de manière à trouver le maximum de la courbe de gain laser. La variation du réseau de Bragg et l'utilisation de la SAG ont permis une

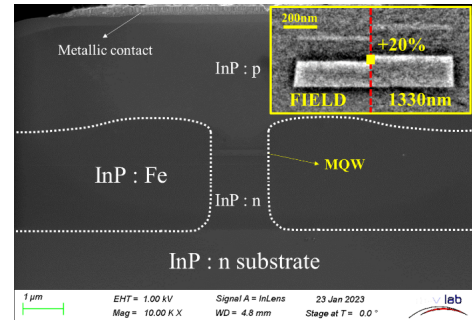


Figure 1 – Image MEB du laser DFB en fin de process

couverture sur toute la bande-O (1260-1360nm)

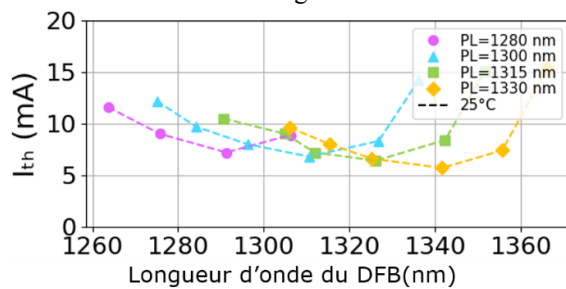


Figure 2 - Ith versus longueur d'onde du DFB

La figure 2 montre les valeurs de courant de seuil (I_{th}) en fonction de la longueur d'onde du réseau DFB en opération impulsif. Une faible I_{th} de < 7,5 mA est obtenue pour le laser optimisé de chaque groupe, correspondant à celui où le pic de courbe de gain correspond à la longueur d'onde du DFB. Des puissances de sortie de >10 mW ont été également obtenues à 25 °C.

[1] M. Smit et al., APL Photonics 4, 050901 (2019)

[2] F. Lemaitre et al., IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 25(5), 1-8. (2019)

[3] H. Debrégas et al., 2017 Optical Fiber Communications Conference and Exhibition (OFC), p.1-3. (2017)

Jeudi 9h20-9h40

Impact of InGaN quantum well thickness on carriers lateral diffusion length

Simon Litschgi^{1*}, Amélie Dussaigne¹, Bruno Gayral², Névine Rochat¹, and Fabian Rol¹

¹ CEA, LETI, Univ. Grenoble Alpes, 38000 Grenoble, France

² CEA, IRIG-PHELIQS, Univ. Grenoble Alpes, 38000 Grenoble, France

*Contact : simon.litschgi@cea.fr

The high brightness and robustness of InGaN micro-Light Emitting Diodes (μLEDs) make them promising candidates for numerous applications, ranging from micro-display to chip-to-chip optical communication. However, small μLEDs suffer from a drastic efficiency loss due to the relative increase of non-radiative defects on sidewalls. This issue would not have severe consequences on μLEDs performances if diffusion length (L_D) was around hundreds of nanometers. Nevertheless recent measurement revealed L_D ~10 μm in some conditions [1]. The epi-stack usually used for μLEDs has been optimized for lighting applications. Our motivation now is to optimize the epi-structure to specifically improve μLEDs performances.

As a first step, we are studying the impact of QWs thickness on the lateral carrier's diffusion length. Four samples grown by Metalorganic Vapor Phase Epitaxy (MOVPE) are studied. Their only variable parameter is the single QW thickness (d_{QW}): 1.5nm, 2.5nm, 3.5nm, and 4.5nm. As L_D depends on carrier's lifetime τ such that L_D ~ τ^{1/2}, reducing τ is expected to improve μLEDs performances. In addition, the presence of a strong internal

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

electric field in c-plane InGaN QWs leads to the so-called Quantum Confined Stark Effect (QCSE) that tends to vertically separate the electron and hole wavefunctions, reducing their overlap and thus increasing τ . Consequently, an increase in L_D with d_{QW} is expected to be measured. Two methods were employed to investigate carrier's diffusion. The first one is based on micro-photoluminescence (μ PL, [1]): free carriers are generated in the QW under a laser spot ($\sim 1 \mu\text{m}$ diameter) and after lateral diffusion, carriers recombine over a larger emission spot. By collecting the PL on a camera, radial intensity profiles can be plotted. For the second method ([2]), opaque metal pads have been deposited on our samples. A cathodoluminescence (CL) scan over the metal (transparent to electrons) to the mask-edge region, allows to collect only the photons emitted under Similar trends are observed from both experiments: increases as increases, which is consistent with the increase in QCSE. A study on diffusion length as a function of carrier density will also be presented, and the impact of the decrease of on PL efficiency of small etched mesa is ongoing.

[1] A. David, Phys. Rev. Applied, vol. 15, no 5, p. 054015, mai 2021, doi: 10.1103/PhysRevApplied.15.054015.

[2] P. C. Sercel et al., International Technical Digest on Electron Devices Meeting, Washington, DC, USA: IEEE, 1989, p. 285-288. Doi :10.1109/IEDM.1989.74280.

Jeudi 9h40-10h

Epitaxy-driven altermagnetic phase in Mn_5Si_3 thin films

I. Kounta¹, H. Reichlova^{2,3}, D. Kriegner^{2,3}, R. Lopes Seeger⁴, A. Bad'ura⁵, M. Leiviskä⁴,
J. Rial⁴, S. Bertaina⁶, M. Petit¹, P. Doležal⁵, E. Schmoranzero⁵, L. Smejkal^{7,3},
J. Sinova^{7,3}, V. Baltz⁴, S. T. B. Goennenwein^{8,2}, L. Michez^{1,*}

¹ Aix Marseille Univ, CNRS, CINaM, Marseille, France

² IFM, Technische Universität Dresden, Dresden, Germany

³ Institute of Physics, Czech Academy of Sciences, Czech Republic

⁴ Univ. Grenoble Alpes, CNRS, CEA, Grenoble INP, Spintec, Grenoble, France

⁵ Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Prague, Czech Republic

⁶ Aix Marseille Univ, CNRS, IM2NP, Marseille, France

⁷ Institut für Physik, Johannes Gutenberg Universität Mainz, Germany

⁸ Universität Konstanz, Fachbereich Physik, Konstanz

*lise.michez@univ-amu.fr

For many years, the anomalous Hall was believed to be exclusively present in ferromagnetic materials. However, it has been recently shown that these effects can be finite also in certain collinear antiferromagnets displaying a specific crystal and spin symmetry, which tremendously broadens the pool of materials in which spontaneous Hall is expected [L. Smejkal *et al.*, *Phys. Rev. X* **12** (2022) 040501]. Here, we report on a route to grow epitaxial Mn_5Si_3 thin films on Si(111). To this end, we use Mn and Si codeposition in a molecular beam epitaxy system, and carefully tune the deposition rates, the growth temperature, and the annealing temperature. The silicide phase-formation and morphology were assessed using reflection high-energy electron diffraction, X-ray diffraction, high resolution transmission electron microscopy and atomic force microscopy. We show that it is possible to grow high quality crystalline Mn_5Si_3 thin films using interface engineering by means of a thin interfacial MnSi layer [I. Kounta *et al.*, *Phys. Rev. Materials* **7** (2023) 02441]. The latter acts as a seed layer for stabilizing the Mn_5Si_3 phase onto Si(111) substrate (Fig. 1a). The Mn_5Si_3 crystalline quality is intimately related to MnSi strain-state that can be tuned with growth parameters. The magnetic behaviour of our films differs from the bulk and polycrystalline materials showing an enhanced transition temperature (~ 200 K) between the AF collinear and paramagnetic states (Fig. 1c). This is attributed to its singular crystal structure that stays hexagonal in the whole temperature range unlike in bulk Mn_5Si_3 in which the magnetic arrangement transitions are followed by structural changes. The specific spin structure in thin films leads to a large spontaneous Hall effect up to its higher magnetic transition (~ 200 K) (Fig. 1b) [H. Reichlova *et al.*, arXiv:2012.15651 (2020)]. This effect strength is directly related to the crystal quality (Fig. 1d), highlighting its electronic band-structure origin.

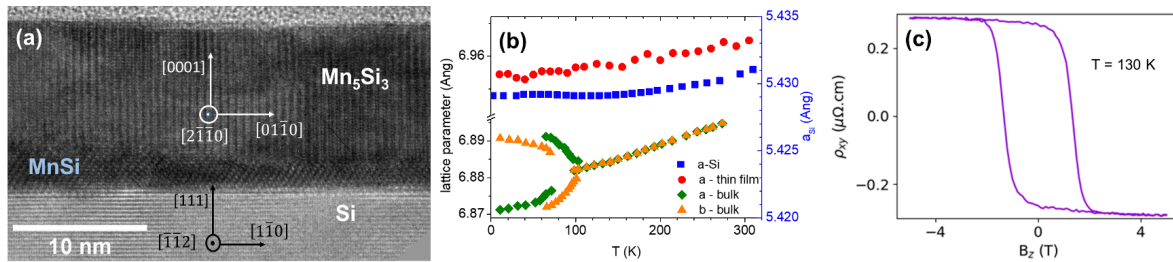


Figure 1: (a) HRTEM cross-section of a 13-nm thick Mn_5Si_3 thin film grown on Si(111). (b) Temperature dependence of in-plane lattice parameters 'a' of Mn_5Si_3 thin films (red dots) following the same monotoneous trend of the Si substrate (blue square). For the sake of comparison, the temperature variation of the 'a' and 'b' parameters in bulk material is shown by green losanges and orange triangle, respectively. (c) Anomalous Hall resistivity in the antiferromagnetic phase measured at 130K, corresponding to a spontaneous Hall conductivity of ~ 5 S/cm.

Jeudi 10h-10h20

Hexagonal Ge on self-assisted GaAs Nanowires for light emission

Iuliia Dudko^{1,2}, Thomas Dursap¹, Anne D. Lamirand¹, Claude Botella¹, Philippe Regreny¹, Alexandre Danescu¹, Solène Brottet¹, Matthieu Bugnet³, Sumeet Walia², Nicolas Chauvin¹, Jose Penuelas^{1*}

¹ Univ Lyon, Ecole Centrale de Lyon, CNRS, INSA Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CPE Lyon, INL, UMR 5270, 69130 Ecully, France

² School of Engineering, RMIT University, Melbourne 3001, Victoria, Australia

³ Univ Lyon, CNRS, INSA Lyon, UCBL, MATEIS, UMR 5510, 69621 Villeurbanne, France
*jose.penuelas@ec-lyon.fr

The recent demonstration of direct band gap emission in hexagonal Ge is attracting great interest in the field of optoelectronics. So far, hexagonal (Si)Ge have been fabricated by epitaxial growth on the facets of wurtzite GaAs or GaP nanowires [1].

In our work, hexagonal Ge has been grown on the facets of self-assisted GaAs nanowires by MBE using VLS mechanism [2]. An extended pure wurtzite segment was maintained by tuning the V/III ratio to appropriate values [3]. Following the growth of the GaAs core, a Ge shell has been grown with a long hexagonal segment. The crystal structure of the nanowires has been characterized with high-resolution scanning transmission electron microscopy (STEM) and dark field transmission electron microscope (TEM). The Ge surface chemistry was studied by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) showing a strong As contamination that can be decreased by tuning some growth parameters.

Photoluminescence spectroscopy (PL) was performed to investigate the optical properties of the hexagonal Ge phase. Furthermore, the quantum confinement can be achieved in hexagonal Ge, leading to a blueshift of the emission.

[1] Fadaly, E.M.T. *et al.* (2020). Nature, 580, 205.

[2] Dudko, I. (2022). Hexagonal Ge Grown by Molecular Beam Epitaxy on Self-Assisted GaAs Nanowires. Crystal Growth & Design, 22, 32-36.

[3] Dursap, T. (2021). Wurtzite phase control for self-assisted GaAs nanowires grown by molecular beam epitaxy. Nanotechnology, 32, 155602.

Acknowledgment: This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No 801512.

Axe 8: Fonctionnalisation des matériaux

Catherine MARICHY, Laurence MÉCHIN

Jeudi 10h50-11h20

Technologie des couches tampons en quartz épitaxié sur silicium pour des dispositifs d'oxyde intégrés durables et à grande échelle

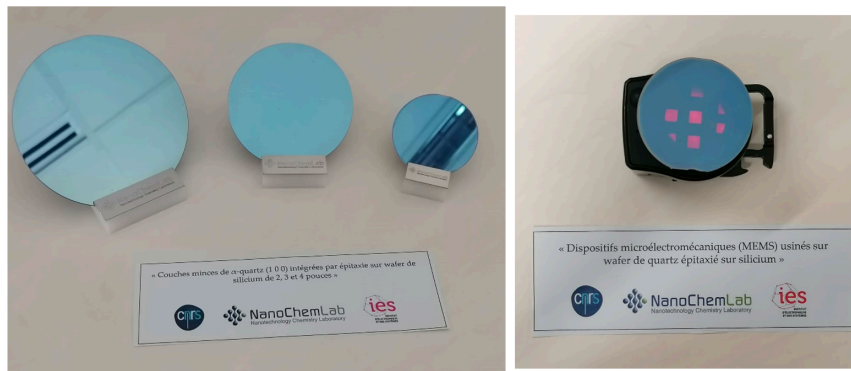
Adrian Carretero-Genevrier

Institut d'Electronique et des Systèmes (IES), CNRS, Université de Montpellier, 860 Rue de Saint Priest 34095 Montpellier, France.

* carretero@ies.univ-montp2.fr

Une intégration industrielle de couches minces et de nanostructures d'oxyde épitaxiés sur le silicium est fortement souhaitable étant donné la large gamme de propriétés physiques de ces matériaux qui peuvent fournir de nouveaux dispositifs sur puce. Cependant, pour parvenir à une intégration efficace des technologies de couches minces épitaxiées, le substrat de silicium doit être à la fois chimiquement et structurellement compatible avec la couche souhaitée afin d'éviter la formation de défauts interfaciaux indésirables, et doit être économiquement réalisable pour une production à grande échelle. Par conséquent, les défis techniques tels que la compatibilité des étapes de fabrication individuelles pour exploiter ces avancées et les déployer sur le marché imposent des conditions sévères pour l'ensemble du processus d'intégration des matériaux. Dans cet exposé, je présenterai différents exemples d'intégration réussie sur silicium de couches minces et nanostructures d'oxydes fonctionnelles en utilisant une nouvelle technologie de substrats virtuels à base d' α -quartz.

Toutes ces oxydes sont actuellement utilisés dans différents projets pour produire des capteurs rentables, des micro-sources d'énergie, ou encore des catalyseurs efficaces entre autres applications. Certaines des applications de ces dispositifs développés seront détaillées et discutées au cours de cet exposé.



Intégration et mise à l'échelle de couches mince d' α -quartz épitaxiées (100) sur plaquette de silicium jusqu'à 6 pouces. Fabrication de capteurs et d'actionneurs innovants sous la forme de MEMS piézoélectriques. (www.nanochemlab.com)

Epitaxial $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$ thin films on buffered silicon substrates for high-performance uncooled infrared bolometers

L. Méchin^{1*}, V.M. Nascimento¹, S. Liu¹, V. Pierron¹, Z. Wang², C. Adamo², D.G. Schlom^{2,3}, B. Guillet¹

⁴ Normandie Univ, UNICAEN, ENSICAEN, CNRS, GREYC, 14000 Caen, France

⁵ Dpt of Materials Science and Engineering, Cornell University, Ithaca, New York 14853-1501, USA

⁶ Kavli Institute at Cornell for Nanoscale Science, Ithaca, New York 14853, USA

* laurence.mechin@ensicaen.fr

$\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$ (LSMO) is a promising material for the realization of uncooled infrared bolometers since it shows a strong variation of electrical resistivity as a function of temperature close to 300 K [1]. It also has a very low noise level compared to other resistive materials [2]. In the last decade we have been focusing our efforts on the use of buffer layers for the epitaxial growth of LSMO thin films on silicon and the optimization of the technological fabrication steps including silicon micromachining. SrTiO_3 (STO) or CaTiO_3 (CTO) buffer layers were first grown by Molecular Beam Epitaxy (MBE). LSMO films of thickness in the 10 – 100 nm range were grown either by MBE or by Pulsed Laser Deposition. Suspended bridges were fabricated using a combination of ion beam etching for STO or CTO and LSMO etching and reactive ion etching in SF_6 for Si etching to form single line structures or square areas constituted of parallel lines (of width 2 or 4 μm and of length in the 50 – 200 μm range) [3, 4] (figure 1). Electro-thermal characterizations of the fabricated sensors were first performed in order to determine the operating conditions in temperature and current bias. Noise Equivalent Power (NEP) values, defined as the minimal value of the incident light power that can be detected, were measured to be of the order of 1 $\text{pW}\cdot\text{Hz}^{-1/2}$ at 300 K in the visible and the infrared range. The developed process opens new perspectives for other MicroElectromechanical Systems (MEMS) type devices and will be discussed at the end of the presentation.

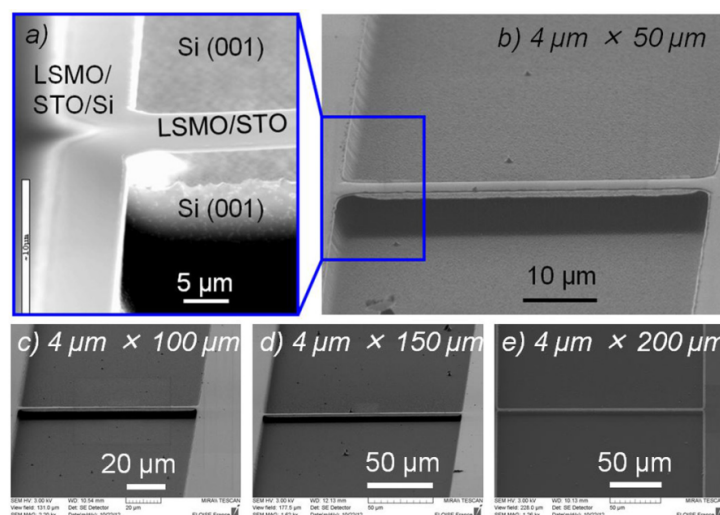


Figure 1: Scanning Electron Microscopy photograph of the suspended LSMO bridges of width 4 μm and length 50 μm to 200 μm [3].

[1] A. Urushibara, et al., Phys. Rev. B, 51 (20) 14103 (1995).

[2] L. Méchin, et al., J. Phys. D: Appl. Phys. - Fast Track Communication 46 202001 (2013)

[3] S. Liu, et al., J. Micromech. Microeng., 29, 065008 (2019).

[4] V. M. Nascimento et al., J. Phys. D: Appl. Phys. 54 055301 (2021).

Jeudi 11h40-12h

Croissance en solution par épitaxie en phase liquide de couches minces cristallines de fluorures dopés terres-rares pour des applications laser

Gurvan BRASSE, Abdelmjid BENAYAD, Pavel LOIKO, Patrice CAMY
Centre de Recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique (CIMAP)
UMR 6252 CEA-CNRS-ENSICAEN-Normandie Université
6 Boulevard du Maréchal Juin, 14000 CAEN
gurvan.brasse@ensicaen.fr

Les travaux présentés dans cette communication portent sur la croissance par épitaxie en phase liquide (LPE) de couches minces cristallines de fluorures dopés terres-rares (TR³⁺), pour des applications laser, en particulier sous la forme de guides d'ondes laser planaires ou microstructurés. Ces couches minces épitaxiées peuvent être dans notre cas, de type LiYF₄:TR³⁺/LiYF₄ (YLF) ou CaF₂:TR³⁺/CaF₂, la nature de l'ion dopant étant définie par le domaine de longueur d'onde visé. Les fluorures sont en effet des matériaux reconnus pour leurs propriétés optiques et laser très intéressantes, en particulier grâce à leur large fenêtre de transparence allant de l'UV jusqu'au moyen-infrarouge, leurs faibles énergies de phonons et de bonnes propriétés thermo-mécaniques.

Le procédé de croissance par LPE sera présenté, ainsi que les difficultés expérimentales rencontrées [1]. Les substrats ayant une importance capitale pour la croissance de couches minces, un focus sera fait sur leur élaboration et/ou leur préparation, ainsi que sur les caractéristiques exigées. En effet, les dispositifs laser développés à partir de ces couches minces épitaxiées requièrent une très grande qualité optique de ces dernières. Il est donc essentiel que ces couches minces présentent le moins de défauts possible (inclusions, impuretés, microfissures, centres diffusants...) mais également une très faible rugosité de la surface de la couche (de l'ordre du nm) et une grande qualité / homogénéité de l'interface couche/substrat. La mise en forme et le polissage des couches minces épitaxiées, brutes de croissance, sous la forme de guides d'ondes laser est également très délicate et seront aussi évoqués dans cette présentation.

Les principales méthodes mises en oeuvre pour caractériser les propriétés physico-chimiques, microstructurales et spectroscopiques de ces couches épitaxiées seront ensuite présentées et discutées [2]. Enfin, nous concluons avec quelques exemples de résultats laser obtenus à partir de dispositifs basés sur des couches minces épitaxiées de fluorures dopés TR³⁺ [3][4].

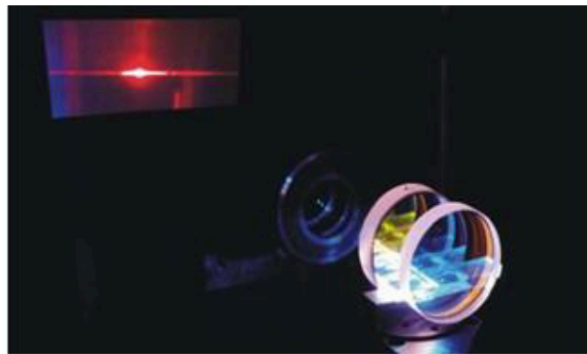


Figure : Emissions laser rouge @639.4nm d'un guide d'onde planaire de LiYF₄:Pr³⁺ pompé @ 79 nm par OPSL

- [1] L. Bazyrova, G. Brasse, P. Loiko et al. « Liquid phase epitaxy growth and structural characterization of highly-doped Er³⁺:LiYF₄ thin films », accepted for publication in Optical Materials (2022)
- [2] P. Loiko, G. Brasse, L. Bazyrova, et al., « Spectroscopy of Tm³⁺-doped CaF₂ waveguiding thin films grown by Liquid Phase Epitaxy », Journal of Luminescence Volume 238, 118109 (2021)
- [3] P. Loiko, E. Kifle, G. Brasse, et al. « In-band pumped Tm,Ho:LiYF₄ waveguide laser », Optics Express Vol. 30, Issue 7, pp. 11840-11847 (2022)
- [4] R. Soulard, M. Salhi, G. Brasse, P. Loiko, et al. « Laser operation of highly-doped Tm:LiYF₄ epitaxies: towards thin-disk lasers », Vol. 27, No. 6, OPTICS EXPRESS 9287 (2019)

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

Jeudi 12h-12h30

L'utilité de la fonctionnalisation des matériaux carbonés dans la conception de capteurs dédiés à la détection de polluants atmosphériques.

Amadou NDIAYE^{1*}, Christelle VARENNE², Jérôme BRUNET², Alain PAULY²

¹ Université Clermont Auvergne, CNRS, Institut Pascal, F-63000 Clermont-Ferrand, France

² Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, Institut Pascal, F-63000 Clermont-Ferrand, France

* amadou.ndiaye@uca.fr

Avec les avancées des nanotechnologies, les matériaux 1D ou 2D sont de plus mis en avant pour leurs propriétés exceptionnelles inhérentes à leurs faibles dimensions. Parmi ces matériaux, les nanomatériaux carbonés (nanotubes de carbone, graphène etc.) occupent une place très importante, du fait de leurs propriétés mécaniques, optiques et électroniques exceptionnelles mais surtout grâce à leur grande surface spécifique. Cette dernière propriété explique le choix de ces nanomatériaux comme matériaux sensibles dans le domaine des capteurs. De plus l'environnement chimique de leur surface est très sensible à l'adsorption de corps étrangers ou à un stimulus. Cette réactivité combinée à leur grande capacité d'adsorption leur confère des propriétés essentielles dans le domaine des capteurs.

Cependant cette grande sensibilité aux gaz est souvent un problème dans le domaine des capteurs puisqu'elle se traduit en une réactivité non spécifiée et simultanée à d'autres gaz en même temps. C'est dans ce contexte que ces nanomatériaux sont fonctionnalisés pour leur apporter une réactivité spécifique. Les molécules ou agents fonctionnels sont ainsi associés aux matrices nanocarbonées pour accéder à des performances ou des propriétés que les entités individuelles ne permettent pas d'obtenir. Ainsi, des nanoparticules, des molécules, des macrocycles, des oxydes métalliques etc. sont greffés ou incorporés à ces matrices nanocarbonées pour des applications variées.

Les macrocycles tels que les phtalocyanines ou porphyrines, du fait de leur nuage d'électrons fortement délocalisés, sont de potentiels candidats pour des applications capteur. En effet ces macrocycles peuvent être ainsi utilisés pour rendre des matériaux comme le graphène ou les nanotubes de carbone plus sensibles à la détection de gaz. Ces macrocycles présentent l'avantage d'être adaptés pour la fonctionnalisation aussi bien par voie covalente que non covalente, et possèdent de plus eux-mêmes des propriétés physicochimiques essentielles pour des applications envisagées notamment dans le domaine des capteurs. Ils peuvent également être déposés en films minces par plusieurs techniques chimiques ou physiques (par évaporation thermique par exemple). Ils peuvent par exemple être mis en avant pour la détection d'espèces polluantes comme les BTX (Benzène, toluène, xylènes) du fait de leur nuage électronique. En dehors des macrocycles, des nanoparticules, des oxydes métalliques et d'autres types de molécules fonctionnelles peuvent être aussi utilisés comme agent fonctionnalisant pour détecter d'autres gaz (H₂S, SO₂, NH₃, O₃ etc.).

Dans cette présentation, je parlerai des choix des matériaux, du type de fonctionnalisation et des caractérisations physico-chimiques. Ensuite, j'aborderai leurs utilisations comme matériaux sensibles et les modes de transductions. Enfin, j'exposerai les performances métrologiques des capteurs utilisant ces matériaux sensibles vis-à-vis de certains gaz polluants cibles.

Jeudi 12h30-12h50

Structuration de surface du 4H-SiC en macro-marches parallèles à partir d'un sandwich SiC/Si(liq)/SiC

G. Ferro^{1*}, Y. Jousseume¹, F. Cauwet¹

¹ Laboratoire des Multimatériaux et Interfaces, UMR CNRS 5615, 6 rue Victor Grignard, Université Claude Bernard Lyon 1, 69622 Villeurbanne

* gabriel.ferro@univ-lyon1.fr

Les transistors MOSFET font partie des composants électroniques de puissance les plus vendus de la filière 4H-SiC. Leurs performances restent cependant encore en dessous de celles attendues en raison de la faible mobilité des porteurs de charge au niveau du canal d'inversion, attribuée à la présence de pièges électroniques à l'interface 4H-SiC/SiO₂. Des études récentes suggèrent que ces pièges seraient localisés en majorité sur les



Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

bords de marche à la surface du 4H-SiC. La densité de ces pièges et leur influence pourraient être modulées en structurant la surface en macro-marches régulières et parallèles. Ce travail porte sur l'utilisation d'une configuration "sandwich" SiC/Si(liq)/SiC pour obtenir une telle structuration de surface sur des substrats 4H-SiC monocristallins (4°off, face Si). Le SiC supérieur (top) a pour rôle d'étaler de manière homogène le Si liquide par pression et mouillage (Fig. 1). La quantité de Si a été choisie de manière à obtenir un film de 30 μm d'épaisseur après fusion. Les traitements thermiques ont été réalisés dans un réacteur CVD à 1550 °C sous H₂.

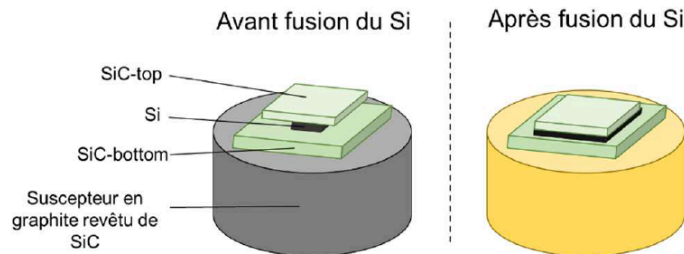


Fig. 1 : Schéma de la configuration sandwich utilisée dans cette thèse, avant et après fusion du Si.

De telles conditions entraînent la reconstruction systématique en macro-marches des deux substrats de SiC de l'empilement mais ces marches sont très souvent irrégulières et peu homogènes (Fig. 2a). Le moteur de cette structuration a été identifié comme étant le gradient thermique vertical dans l'empilement, qui génère un transport du SiC-bottom (chaud = dissolution) vers le SiC-top (froid = croissance). Par contre, si les substrats ont reçu une couche épitaxiale au préalable, la structuration en macro-marches devient très homogène et régulière (Fig. 2b).

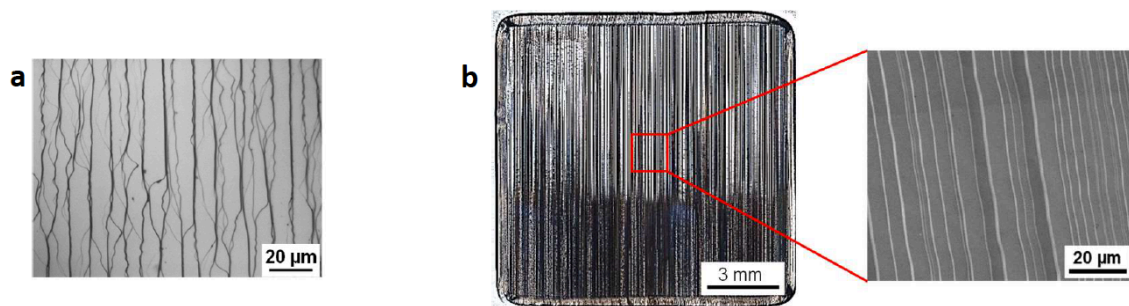


Fig. 2 : Morphologies de surface des substrats SiC-bottom obtenus après structuration sur a) un substrat commercial standard et b) un substrat ayant reçu une couche épitaxiale avant traitement.

Nous montrerons comment la morphologie initiale du substrat influence directement la qualité de la structuration de surface et nous proposerons un mécanisme permettant d'expliquer nos observations.

Axe 7 : Propriétés ultimes et systèmes épitaxiés pour l'ingénierie quantique

Michele AMATO, Hélène CARRERE, Manuel HOUZET

Jeudi 14h-14h30

Isotope- and strain-engineered germanium quantum wells

Simone ASSALI^{1*}

¹ Univ. Grenoble Alpes, CEA, IRIG-DEPHY, F-38000 Grenoble, France

* simone.assali@cea.fr

Hole-based solid-state devices made of group IV semiconductors are now increasingly explored as reliable architectures for quantum processors and memories.[1] The inherently large and tunable spin-orbit coupling (SOC) of holes and their reduced hyperfine coupling with nuclear spins, is essential to establish scalable spin qubits. To this end, confinement of heavy-holes (HHs) in Ge/SiGe quantum well (QW) heterostructures has been extensively studied as a promising solution to develop scalable quantum processors on Si. Despite the reduced hyperfine interaction, the residual nuclear spin bath still perturbs the HH spin qubit behavior.[2] Developing nuclear spin-depleted QWs would thus shed light on the sensitivity of Ge qubits to hyperfine interactions, while decoupling the role of charge noise on the dephasing process. Isotopically engineered QW heterostructures that are depleted from ⁷³Ge, which is the only Ge nuclear spin-full stable isotope, would open new avenues in the fabrication of scalable, robust Ge qubits. With this perspective, herein we demonstrate the epitaxial growth of isotopically purified ⁷⁰Ge QW using a chemical vapor deposition (CVD) reactor.

While a high degree of control over the HH states can now be routinely achieved, similar behavior using light holes (LH) states has been out of reach for decades due to the absence of suitable materials that could provide the required valence band character and its energy offsets. The precise engineering of LH states remains a serious obstacle toward coherent optical photon-spin interfaces needed for a direct mapping of the quantum information encoded in photon flying qubits to stationary spin processors.[3] In this work, we propose an all-group-IV semiconductor low-dimensional system, consisting of a highly tensile strained Ge QW with GeSn as barriers, grown on Si. [4-5] The ability to engineer LH states in group-IV semiconductors enables a unique Si-integrated platform combining the Ge large SOC, the hole quiet quantum environment, and the spin 1/2 of LH, in addition to the tunable bandgap directness and energy in strain-engineered Ge and GeSn. These properties create valuable opportunities to implement new scalable quantum devices and potentially integrate qubits, spin coherent photodetectors, and quantum emitters on the same Si chip.

[1] G. Scappucci *et al.*, Nature Reviews Materials 6, 926-943 (2021).

[2] W. I. L. Lawrie *et al.*, Abstract: K39.00007, APS March Meeting 2022.

[3] R. Vrijen, E. Yablonovitch, Phys. E 10, 569 (2001).

[4] P. Del Vecchio, O. Moutanabbir, Phys. Rev. B 107, L161406 (2023).

[5] S. Assali *et al.*, Advanced Materials 34, 2201192 (2022).

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

Jeudi 14h30-15h

Photodétecteur de la polarisation de la lumière par recombinaison dépendante du spin dans les nitrures dilués.

A. Balocchi^{1,*}, H. Carrère¹, V. G. Ibarra-Sierra², J. C. Sandoval-Santana², V. K. Kalevich³, E. L. Ivchenko³, X. Marie¹, T. Amand¹, A. Kunold²

¹ Université de Toulouse, INSA-CNRS-UPS LPCNO, 135 Avenue Rangueil 31077, Toulouse, France

² Area de Física Teórica y Materia Condensada Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco Av. San Pablo 180, Col. Reynosa-Tamaulipas, 02200 Ciudad de México, México

³ Ioffe Physical-Technical Institute 194021, St. Petersburg, Russia

* andrea.balocchi@insa-toulouse.fr

Tout comme la fréquence et l'intensité, la polarisation est l'une des propriétés fondamentales de la lumière et sa détection est essentielle pour plusieurs applications industrielles et de recherche, de la production de médicaments aux communications optiques. Cependant, la mesure directe de l'hélicité de la lumière est intrinsèquement impossible avec les photodétecteurs conventionnels basés sur des semi-conducteurs III-V ou IV-VI, car ils sont naturellement non chiraux. L'analyse préalable de la polarisation de la lumière par une série d'éléments optiques souvent en mouvement est nécessaire avant que la lumière ne soit envoyée au détecteur. Ici, nous mettons en œuvre une solution simple à ce défi qui permet aux semi-conducteurs conventionnels à base de nitrures dilués d'acquérir une photoconductivité chirale à température ambiante grâce à l'ingénierie des défauts paramagnétiques [1,2]. Son fonctionnement dépend principalement de deux phénomènes : (i) la capture d'électrons dépendante du spin et (ii) l'interaction hyperfine entre les électrons liés et les noyaux sur les centres paramagnétiques Ga²⁺ dans GaAsN. La recombinaison dépendante du spin confère au dispositif une sensibilité au degré de polarisation circulaire, tandis que l'interaction hyperfine permet de discriminer l'orientation de la lumière incidente. Cette approche, qui supprime le besoin d'éléments optiques devant un détecteur non chiral, pourrait faciliter l'intégration et la miniaturisation. En outre, comme le principe de fonctionnement repose sur l'orientation optique des électrons de conduction, la région spectrale de fonctionnement s'étend sur une large gamme de longueurs d'onde jusqu'à la bande interdite du matériau et tant qu'une polarisation de spin non nulle des électrons photoexcités peut être obtenue. Ce paradigme, rendu possible par la présence de défauts paramagnétiques de Ga dans les nitrures dilués, peut en principe être étendu à toute la famille des alliages (In)(Al)GaAsN avec des bandes interdites allant du visible à l'infrarouge. La possibilité de produire des défauts paramagnétiques par implantation [4] dans des alliages sans N pourrait également offrir d'autres possibilités d'application.

[1] Advanced Func. Materials, 31 (2021) 10.1002/adfm.202102003

[2] Phys. Rev. Applied, 15 064040 (2021)

[3] Journal of Luminescence 251 (2022) 119163

[4] Appl. Phys. Lett 103, 052403 (2013) 10.1063/1.4816970

Jeudi 15h-15h20

II-VI quantum dots in nanowires: tools to fine-tune optical properties

F. Granger¹, G. Nogues², M. Den Hertog², Y. Genuist², R. André², D. Ferrand², K. Kheng¹, E. Bellet-Amalric¹ and J. Cibert²

¹ Univ. Grenoble Alpes, CEA, INAC, F-38000 Grenoble, France

² Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Institut NEEL, F-38000 Grenoble, France

joel.cibert@neel.cnrs.fr

The dot-in-a-nanowire (QD-NW) configuration is extremely flexible and virtually any material combination, any dot shape and any built-in strain can be realized, as compared to Stranski-Krastanov growth which results in flat QDs under compressive strain. It allows to engineer the hole states in semiconductor dots, and tailor their orbital and spin states: the ground state of a long ($L/D \gg 1$) QD is a light hole while for a short one ($L/D < 1$) it is a heavy hole. Additionally, the growth of tapered NWs with a thin core embedding a QD and a thick shell



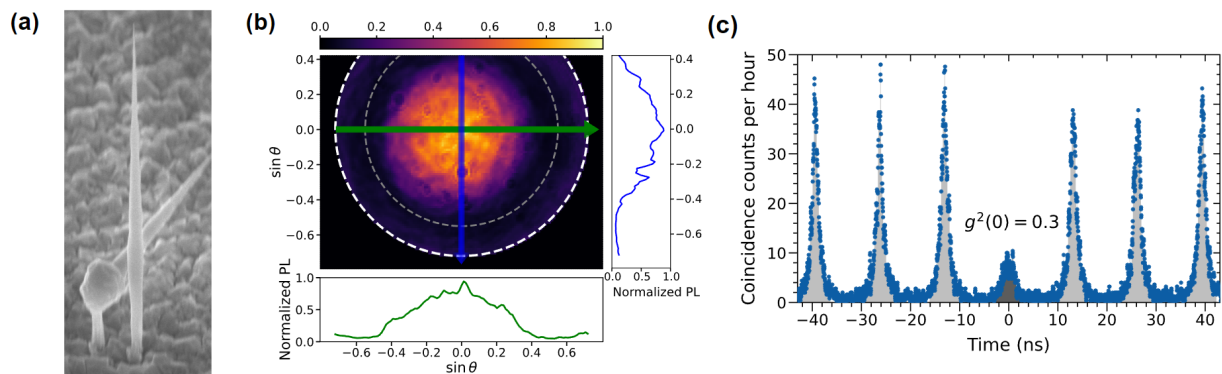
Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

enhances the light extraction efficiency. This acts as a single-mode waveguide, helping the light emitted by the QD to be released into free space.

Our NWs are grown by molecular beam epitaxy on GaAs (111)B substrate after insertion of a II-VI buffer layer. This results in the vapor–solid–solid (VSS) growth mechanism. Although it is well adapted for the size and compositional control of the QD-NW system, VSS still remains much less understood than VLS. In particular, the role of the catalyst nanoparticle has been mainly overlooked. We show that the epitaxial relations with respect semiconductor play a key role in the nucleation and growth of the NWs.¹ A model of the growth helps us to understand the different steps, *e.g.*, the evaporation of Cd during the growth, or the dynamics of the steps along the NW sidewalls which determine its final shape.

ZnTe nanowires incorporating long and short CdTe insertions were studied by cathodo- and micro-photoluminescence spectroscopy.² The light-hole nature of the exciton in long QDs was assessed from the polarization of the emitted light and confirmed by a complete study of the emission diagram and of magneto-



optical spectroscopy.

In the case of ZnSe-CdSe QD-NWs emitting single photons at room temperature in the blue-green range, allowing for quantum communications in free space and underwater, see Figure.³

[1] M. Orrù *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **110**, 263107 (2017).

[2] M. Jeannin *et al.*, *Phys. Rev. B* **95**, 035305 (2017)

[3] F. Granger *et al.*, 2023. hal-04034474.

Figure: (a) SEM image of a vertical and tapered ZnSe NW embedding a CdSe QD (b) Radiation pattern and (c) autocorrelation histogram at 300K showing the focusing effect of the NW and the single-photon nature of the emission.

Jeudi 15h20-15h40

InAs/ZnTe core-shell nanowires for hybrid superconductor-semiconductor structures

D. Mosiats,^{ab} S. Tan,^{c,d} S. Frolov,^e J. Cibert,^a M. Hocevar,^a E. Bellet-Amalric,^b

^aUniv. Grenoble-Alpes, CNRS, Inst. NEEL, 38042 Grenoble, France.

^bUniv. Grenoble-Alpes, CEA, Grenoble-INP, IRIG, PHELIQS, 38000 Grenoble, France.

^cDepartment of Electrical and Computer Engineering, Univ. of Pittsburgh, Pittsburgh, USA

^dPetersen Institute of NanoScience and Engineering, Univ. of Pittsburgh, Pittsburgh, USA

^eDepartment of Physics and Astronomy, Univ. of Pittsburgh, Pittsburgh, USA

edith.bellet-amalric@cea.fr

Hybrid superconductor-semiconductor structures are a major thrust in quantum computing because they hold the promise of decreasing quantum bit decoherence thanks to their topological properties [1]. Yet, topological superconducting states have not been clearly observed in those hybrid structures. This is ascribed to the presence of subgap states in devices with insufficient materials and interface quality and a too strong coupling between the superconductor and the semiconductor. One solution consists in intercalating a lattice-matched tunnel barrier between the superconductor and the semiconductor [2]. An optimal solution involves growing a semiconductor core plus barrier shell and a superconductor shell in a multi-chamber molecular beam epitaxy cluster.

Our choice is an InAs core with a ZnTe shell. InAs nanowires have strong orbit coupling, high mobility, grow easily with the Au assisted vapour liquid solid mechanism, and have demonstrated high potential when integrated into quantum devices. ZnTe is a large bandgap II-VI semiconductor, lattice matched with InAs. Results on the morphology of the InAs core nanowires with respect to the growth parameters (In, and As fluxes) and the initial gold catalyst diameter reveal 2 limiting regimes: i) a $1/r$ dependence evidencing the diffusion of In adatoms and ii) a cutoff at small radius due to As desorption (Kelvin effect). We describe the growth of thin ZnTe shells around the InAs core, with a thickness down to a few nanometers. As a result, the length-diameter dependence of the core-shell nanowires is similar to the core-only nanowires, but for a shift towards larger diameters by twice the shell thickness (Fig. 1A). The radial growth is epitaxial as seen in Fig. 1B. If defects are present in the InAs core (stacking faults, zinc-blende inclusions), they replicate in the ZnTe shell, and induce a local change of the shell thickness. No defects are observed in the ZnTe shell when the InAs core is defect-free.

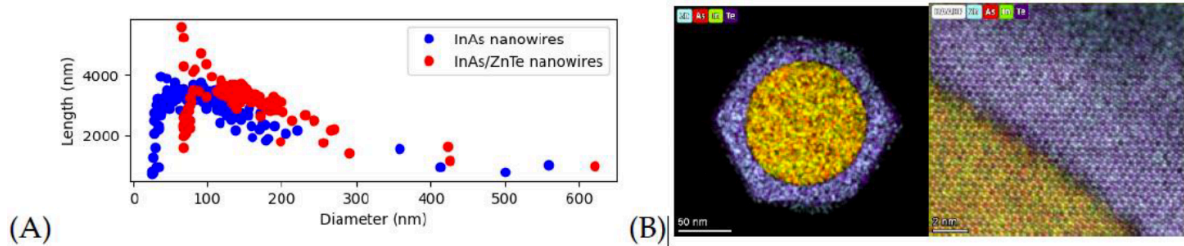


Figure 1: (A) Length versus diameter of InAs core and InAs/ZnTe core/shell nanowires. The shift in diameter corresponds to twice the shell thickness (B) Images of InAs/ZnTe core-shell nanowire cross section. Left: TEM-EDS. Right: HAADF and EDS superimposed.

- [1] S.M Frolov et al., Nat. Phys. **16**, 718 (2020).
[2] G. Badawy et al., Phys. Rev. Materials **7**, 016201 (2023).

Jeudi 15h40-16h10

Theoretical Insights into 2D Materials for Optoelectronic Applications

Michele RE FIORENTIN^{1,*}

¹Department of Applied Science and Technology, Politecnico di Torino
Corso Duca degli Abruzzi 24, 10129 Torino, Italy

* michele.refiorentin@polito.it

Two-dimensional (2D) materials have gained significant attention due to their unique electronic and optical properties. In this presentation, I will discuss three recent theoretical studies that explore the use of 2D materials for optoelectronic applications.

Firstly, semiconducting 2D materials with the chemical formula MoSi_2X_4 ($\text{X} = \text{N}, \text{P}, \text{or As}$) are investigated through atomistic simulations. By employing advanced first-principles techniques, the electronic bandgaps of MoSi_2X_4 are accurately determined, highlighting the absence of lateral valleys near the conduction band minimum. The optical properties are dominated by strongly bound excitons, comparable to transition metal dichalcogenides. The presence of outer SiX layers leads to lower exciton binding energies, making MoSi_2X_4 promising for ultra-thin optoelectronic devices [1].

Secondly, we explore vertical van der Waals heterostructures using PdS_2 and PtS_2 . Ab initio many-body perturbation theory techniques unveil outstanding light absorbance up to 50% in the visible spectrum. The resulting heterostructure exhibits large theoretical maximum short-circuit current density under solar irradiation. Furthermore, the excitonic landscape predicts partial charge separation and increased carrier diffusion length, indicating the potential for highly efficient atomic-thin photovoltaic devices [2].

Lastly, we investigate the application of InSe monolayers with point defects as a single-photon emitters (SPE). Substitutional defects with group IV, V, and VI atoms introduce deep defect states within the InSe band gap. Bethe-Salpeter equation calculations on the GW-corrected electronic band structure reveal a strongly peaked emission spectrum in the near-infrared. The high localization of the defect-induced electronic states positions InSe as a promising material for SPE applications [3].

These examples should serve as indication of the power of theoretical simulations in revealing the vast potential of 2D materials in optoelectronic applications while aiming to inspire and drive experimental and technological investigations in this exciting field.

- [1] MRF et al., npj 2D Materials and Applications (2022) 6:81

Conférence MATÉPI2023

Paris, 3-6 Juillet 2023

- [2] L. Bastonero *et al.*, ACS Appl. Mater. Interfaces 2021, 13, 43615–43621
[3] M. Salomone *et al.*, J. Phys. Chem. Lett. 2021, 12, 10947–10952

