

Ecole Doctorale des Sciences Fondamentales

SUJET DE THESE

Titre de la thèse : Compréhension et contrôle des mécanismes de croissance de structures nanométriques nitrurées d'éléments III (InGaN) et leur caractérisation fine par spectroscopies électroniques combinées.

Directeur de thèse : Christine ROBERT-GOUMET (50%)
Unité de rattachement : Institut Pascal, axe PHOTON
Equipe : Surfaces et Interfaces
Etablissement de rattachement : UCA, CNRS
Courriel et téléphone : christine.robert-goumet@uca.fr

Co-encadrant éventuel : Guillaume MONIER (25%)
Unité de rattachement : Institut Pascal, axe PHOTON
Etablissement de rattachement : UCA, CNRS

Co-encadrant éventuel : Philip HOGGAN (25%)
Unité de rattachement : Institut Pascal, axe PHOTON
Etablissement de rattachement : UCA, CNRS

Résumé :

Les nitrures d'éléments III sont des matériaux fonctionnels qui sont principalement utilisés dans les domaines de l'éclairage et de l'électronique de puissance. Mais leurs propriétés permettent des applications bien plus larges : détection par effets photoniques, électroniques, piézoélectriques et en optique non linéaire. De nouvelles fonctions peuvent être rendues possibles par la création de nanostructures tridimensionnelles. En effet, en réduisant les dimensions du système (de la masse 3D, sur les couches minces 2D, aux nanostructures 1D), les propriétés physiques peuvent changer radicalement, conduisant à de nouveaux concepts ou avancées technologiques.

Dans cette optique, les objectifs scientifiques de l'équipe Surfaces et Interfaces (S&I) sont tournés vers la compréhension de ces systèmes aux dimensions réduites : surfaces, interfaces, films minces, nano-objets. L'équipe a acquis récemment un tout nouveau système sous ultraviolet qui permet leur synthèse et l'analyse in situ de leurs propriétés structurales, chimiques et électroniques par spectroscopies électroniques.

Ecole Doctorale des Sciences Fondamentales

Le sujet proposé porte sur la compréhension et le contrôle des mécanismes de croissance de structures nanométriques nitrurées telles que le InGaN sur des surfaces semi-conductrices (Si, InP, GaAs). De nombreux paramètres expérimentaux permettent de faire varier la concentration des espèces ainsi que la densité et les dimensions des structures nanométriques réalisées. Les mécanismes de croissance seront étudiés à l'aide des spectroscopies électroniques classiques (XPS/UPS, EELS) associées à des modélisations fines des intensités. Les résultats expérimentaux obtenus seront corroborés par des résultats de simulations cinétiques (Kinetic Monte Carlo KMC) réalisées en collaboration avec le Rzhanov Institute of Semiconductor Physics de Novosibirsk. De plus, l'aspect dynamique de ces systèmes s'étudiera au moyen de simulations Car-Parrinello. La mise en pratique de ces méthodes très chronophages en temps de calcul nécessite des ressources informatiques adéquates : les simulations seront réalisées sur le supercalculateur Jean Zay de GENCI (projet DARI accepté).

Parmi les spectroscopies électroniques implantées dans le nouveau bâti ultravide, le candidat se focalisera, plus particulièrement, sur la méthode d'analyse ARPES (Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy) qui est la seule technique expérimentale capable de cartographier la structure de bande quadridimensionnelle complète (k_x , k_y , k_z et énergie) d'un matériau. En effet, les distributions d'intensité obtenues donnent, par exemple, un accès direct à la surface de Fermi et à la structure électronique du matériau étudié pouvant être utilisées pour calculer des propriétés physiques. Ainsi la compréhension des structures nanométriques fabriquées sera approfondie par l'étude des états électroniques à l'aide de l'ARPES. Les données sur la structure électronique étant difficiles à interpréter, des méthodes de simulation numérique basées la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) seront réalisées. Ces méthodes de plus en plus utilisées dans les domaines des nanosciences et des nanotechnologies constituent la base d'un ensemble d'approches ab-initio permettant d'expliquer et de prédire les propriétés des matériaux et systèmes physico-chimiques.