

Soutenance de Thèse SOLEIL

Spécialité : Chimie du Solide

Dynamical and structural study of functional oxide thin layers : SrTiO₃, VO₂ and Al₂O₃

Weiwei PENG

(Ligne AILES - SOLEIL)

Lundi 4 Avril 2011 à 9h30

Salle Magnat, Bât. 349, Université Paris Sud, Orsay

Afin de développer de nouvelles applications aux couches minces d'oxydes fonctionnels, il est nécessaire de comprendre les corrélations entre leurs modes de croissance, leur microstructure, leur structure à l'interface avec le substrat, et leurs contraintes et propriétés physiques. Pour cela, une étude par spectroscopie infrarouge et THz des systèmes modèles films/substrats a été exécutée, et confrontée à des calculs théoriques, en particulier sur des couches épitaxiales de SrTiO₃/Si(001), VO₂/Gd₂O₃/Si(111) et des couches d'alumine sur alliage d'aluminium. Les caractéristiques vibrationnelles des couches minces sont ici étudiées dans l'infrarouge moyen et lointain sur la ligne AILES du Synchrotron SOLEIL, et simulées à l'aide de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT), permettant ainsi la première détermination de la structure cristalline de ces couches. Ainsi, une comparaison entre la structure bidimensionnelle et tridimensionnelle des matériaux est effectuée. L'effet des contraintes dans les couches est évalué grâce aux variations des énergies de vibration par rapport au matériau massif. L'influence des conditions expérimentales de l'épitaxie dans la structure locale interatomique de couches minces de SrTiO₃/Si(001) est évaluée. D'autre part, la nature de l'interface STO-Si peut être caractérisée par les modes de vibration du réseau cristallin. Enfin, la transition métal-isolant (MIT) des couches minces de VO₂ sur des substrats de Gd₂O₃/Si(111) est étudié par spectroscopie IR ; les variations de propriétés optiques et diélectriques pendant la transition, ainsi que les changements d'intensité des modes de vibration, indiquent que la transition est entraînée par une corrélation électronique et une basse température. La phase monoclinique M1 de VO₂ est un isolant de Mott. Ce résultat peut aider à un meilleur contrôle des MIT de couches minces de VO₂ pour de futures applications.

In order to understand the relations between growth, microstructure, interface structure, strain, and physical properties in functional oxide thin films for further applications, a study of infrared and THz spectroscopy combined with theoretical calculation has been performed on the films/substrates model systems, in particular epitaxial SrTiO₃/Si(001), VO₂/Gd₂O₃/Si(111) films and alumina/alloy films. The vibrational characteristics of the crystal structure of films have been investigated in the mid and far infrared ranges on the AILES beamline at Synchrotron SOLEIL. This experimental vibrational study has been combined with Density Functional Theory (DFT) simulation to allow for the first measure of the crystalline structure of these thin films. The 2-dimensional lattice modification compared with the bulk materials has been discussed. The strain effect in the films can be evaluated on the phonon shifts compared with the crystal spectrum. The influences of epitaxial conditions on the local interatomic structure of SrTiO₃/Si(001) thin films have been estimated. The nature of STO-Si interface can be characterized by the phonon modes. The metal-insulator transition (MIT) of VO₂ thin films on Gd₂O₃/Si(111) substrate have been studied by IR spectroscopy. The variations of optical and dielectric properties during the MIT, as well as the phonon intensities, indicate that the MIT is driven by electron correlation and the low temperature M1 monoclinic phase of VO₂ is a Mott insulator. This result may help to better understand and control the MITs of VO₂ thin films in the device applications.



Vous êtes cordialement invités au pot qui suivra



Formalités d'entrée : accès libre dans l'amphi du Pavillon d'Accueil. Si la manifestation a lieu dans le Grand Amphi Soleil du Bâtiment Central, merci de vous munir d'une pièce d'identité (à échanger à l'accueil contre un badge d'accès).

SYNCHROTRON SOLEIL

Division Expériences - L'Orme des merisiers - Saint-Aubin - BP 48 - 91192 GIF S/YVETTE Cedex

<http://www.synchrotron-soleil.fr/portal/page/portal/Soleil/ToutesActualites>

Secrétariat Division Expériences : sandrine.vasseur@synchrotron-soleil.fr