



Soutenance de thèse

Jeudi 29 mars 2018

14h

C2N, Site d'Orsay, Bâtiment 220 91405 Orsay

Salle Visioconférence

Doriane DJOMANI

« Hétérostructures allotropiques de semiconducteurs IV dans des nanofils:
nouvelles opportunités more- than-Moore »

Composition du jury proposé

Daniel BOUCHIER, Université Paris Sud, Directeur de Thèse

Vincent PAILLARD, Université Toulouse Paul Sabatier, rapporteur

Joël EYMERY, CEA INAC, rapporteur

Mathieu KOCIAK, Université Paris Sud, Examineur

Ilaria ZARDO, University of Basel, Examineur

Gilles PATRIARCHE, C2N, co-directeur de thèse

Eric Le Bourhis, Université de Poitiers, examinateur

Blaise BRUBACH, Synchrotron SOLEIL, Examineur

Pascale ROY, Synchrotron SOLEIL, invité

Laeticia VINCENT, Université Paris Sud, Invité

Résumé

Nous avons découvert une méthode originale pour produire une transformation de phase dans les nanofils de Ge et Si (de structure cubique diamant 3C). Sous l'action d'une contrainte externe à chaud, des nanodomains de structure hexagonale diamant 2H se forment de manière quasi-périodique le long du fil ce qui résulte en un réseau 1D d'hétérostructures 3C/2H. Dans ce contexte, ce projet de thèse vise à mettre en lumière les mécanismes de cette transformation de phase et à caractériser les propriétés physiques de la phase 2H. Nous avons mis en place des analyses structurales systématiques dans les nanofils de Ge et Si-3C/2H pour mettre en évidence les paramètres clés de la transformation de phase. Les nanodomains 2H sont formés dans des bandes de cisaillement de direction $\langle 2-5-5 \rangle$. Une relation d'orientation a été mise en évidence : $\langle 1-10 \rangle 3C // \langle 2-110 \rangle 2H$ et $(110) 3C // (0001) 2H$ et les bandes 2H reposent majoritairement sur les plans d'interface $(115) 3C$. Les études préliminaires montrent que la contrainte de cisaillement et le budget thermique sont nécessaires à la transformation avec une température seuil minimale de 350°C et 500°C pour le Ge et le Si respectivement, ces conditions sont caractéristiques d'une transformation martensitique. Les paramètres clés identifiés sont : l'orientation cristallographique et le diamètre des nanofils. Dans les nanofils de Si, la formation des bandes de cisaillement et donc des domaines 2H est induite par la composante de contrainte de cisaillement dans la direction de glissement du plan interfacial 3C/2H. D'après ces résultats, la transformation de phase serait compatible avec un mécanisme de relaxation plastique via la formation des bandes de cisaillement $[5-5-2](1-15) 2H$. Nous avons réalisé des mesures Raman sur nanofil unique de Ge- et Si-3C/2H pour caractériser les modes de phonons optiques. Dans le Ge, nous avons détecté deux pics à 288 cm^{-1} et 301 cm^{-1} attribués aux modes E2g et F2g + E1g + A1g. Dans le Si, nous avons observé trois pics à 498, 515 et 520 cm^{-1}

respectivement associés aux modes $E2g$, $E1g$ et $A1g + F2g$. Ces valeurs coïncident avec les calculs reportés. Nous avons également mesuré les largeurs de bandes interdites dans les nanofils de Ge-3C/2H par spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier : nous avons obtenu un gap direct à 0,58 eV attribué à la phase 2H et un gap indirect à 0,72 eV qui proviendrait vraisemblablement de la phase 3C. Ces valeurs constituent les premières mesures expérimentales du gap de la phase 2H et vont dans le sens des calculs théoriques qui prédisent un gap étroit et direct.

La phase 2H peut aussi être obtenue dans le massif de Si et Ge après décompression dans une cellule à enclumes de diamant menant à la phase BC8 qui se convertit à température ambiante (dans le Ge) ou à chaud (dans le Si) en phase 2H. Afin de comparer les propriétés du massif, nous avons réalisé des mesures in-situ par spectroscopie Raman et par diffraction des rayons X dans le massif en étudiant différents chemins de décompression. A température ambiante, nous obtenons soit la phase Ge-ST12, soit un mélange des phases Ge-ST12 et Ge-BC8 en fonction de la vitesse de décompression. La nucléation de la phase 2H est donc complexe car elle dépend fortement du chemin de décompression et des conditions hydrostatiques dans la cellule. Ces études révèlent de plus un effet de taille. Dans les nanofils de Ge, nous observons après décompression un retour vers la phase 3C avec une composante amorphe. Les mesures in-situ du gap dans le Ge massif et les nanofils de Ge en fonction de la pression confirment cet effet de taille. Après décompression dans le Ge massif, nous obtenons un gap direct égal à 0,53 eV et un gap indirect valant 0,73 eV. Ces valeurs sont liées à la structure de bandes de la phase Ge-ST12 et s'accordent avec les récents résultats reportés. La mesure dans les nanofils de Ge-3C présente un comportement d'hystérésis, avec le retour vers le gap initial après décompression.