

JSI-2015

<http://jsi2015.sciencesconf.org>

JSI 2015

Toulouse Cemes
28-30 janvier

Les Journées Surfaces et Interfaces

28, 29 et 30 janvier 2015
Centre d'Elaboration de Matériaux et
d'Etudes Structurales, Toulouse



INSA
TOULOUSE



UNIVERSITÉ
TOULOUSE III
PAUL SABATIER



NEXT
Centre d'innovation en Nanotechnologies et Matériaux

IRSAMC
ICAR - LCRQ - LFCNO - LPT

NanoSciences
GRAND SUD - OUEST





Le colloque Journée Surfaces et Interfaces (29^{ème} édition) offre chaque année un point de rencontre pour les spécialistes français de la matière condensée (solide, matière molle) dans le domaine de la physico-chimie des surfaces et des interfaces.

Dans la tradition des éditions précédentes (Nantes 2010, Poitiers 2011, Saclay 2012, Orléans 2013, Lyon 2014), le programme scientifique des Journée Surfaces et Interfaces 2015 s'articulera autour d'une quinzaine de conférences invitées qui présenteront l'état de l'art et les développements récents des disciplines représentées et de deux sessions de communications par affiche. Le programme des JSI 2015 s'intéresse en particulier **aux techniques d'élaboration tant physiques que chimiques** (synthèse physique/chimique, auto-organisation, nano-structuration), **aux caractérisations expérimentales et développements instrumentaux et aux développements théoriques et numériques.**

L'édition 2015 de ces journées est organisée par le CEMES soutenu par les autres laboratoires du campus Toulousain. Cette édition des Journées sera l'occasion de réunir la communauté française autour de ces thématiques. Nous souhaitons que les échanges soient fructueux et porteur de nouvelles collaborations et perspectives.

CONFÉRENCIERS INVITÉS

Laurent Alvarez	Laboratoire Charles Coulomb (L2C, Montpellier)
Stéphane Andrieu	Institut Jean Lamour (IJL Nancy)
Jean-Noël Aqua	Institut des Nanosciences de Paris (INSP, Paris)
Joël Bellessa	Institut Lumière Matière (ILM, Lyon)
Marie-Pierre Gaigeot	Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement (LAMBE, Evry)
Hazar Guesmi	Institut Charles Gerhardt (ICG, Montpellier)
Hocine Khemliche	Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO, Orsay)
Frédéric Leroy	Centre Interdisciplinaire de Nanoscience de Marseille (CINaM, Marseille)
Thierry Ondarçuhu	Centre d'Elaboration de Matériaux et d'Etudes Structurales (CEMES, Toulouse)
François Ozanam	Laboratoire mixte de l'Ecole Polytechnique et du CNRS (LPMC, Palaiseau)
Jean-Yves Piquemal	Laboratoire Interfaces Traitements Organisation et DYnamique des Systèmes (ITODYS, Paris)
Sébastien Plissard	Laboratoire d'Analyse et d'Architecture des Systèmes (LAAS, Toulouse)
Francois Rochet	Laboratoire de Chimie Physique-Matière et Rayonnement (LCPMR, Paris)
Stanislas Rohart	Laboratoire de Physique des Solides (LPS, Orsay)
Guillaume Schull	Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS Strasbourg)
Bénédicte Warot-Fonrose	Centre d'Elaboration de Matériaux et d'Etudes Structurales (CEMES, Toulouse)

COMITÉ SCIENTIFIQUE

Philippe Allongue	PMC, Palaiseau
Pascal Andrezza	CRMD, Orléans
David Babonneau	Institut P', Poitiers
Marie-Paule Besland	IMN, Nantes
Alessandro Coati	Synchrotron Soleil, Saint-Aubin
Geneviève Grenet	INL-ECL, Ecully
Emmanuelle Lacaze	INSP, Paris
Pierre Müller	CINaM, Marseille
Vincent Repain	MPQ, Paris
Nicolas Rougemaille	Institut Néel, Grenoble
Philippe Sonnet	IS2M, Mulhouse

COMITÉ D'ORGANISATION

Coordinateur : **Nicolas Combe** (CEMES, Toulouse)

Magali Benoit	CEMES, MC2
Caroline Bonafos	CEMES, nMat
Nicolas Combe	CEMES, MC2
Chantal Fontaine	LAAS
Lise-Marie Lacroix	LPCNO
Renaud Péchou	CEMES, GNS
Anne Ponchet	CEMES, MC2

EXPOSANTS



www.altec-equipment.com



www.hidenanalytical.com



www.specs.de



www.vatvalve.com



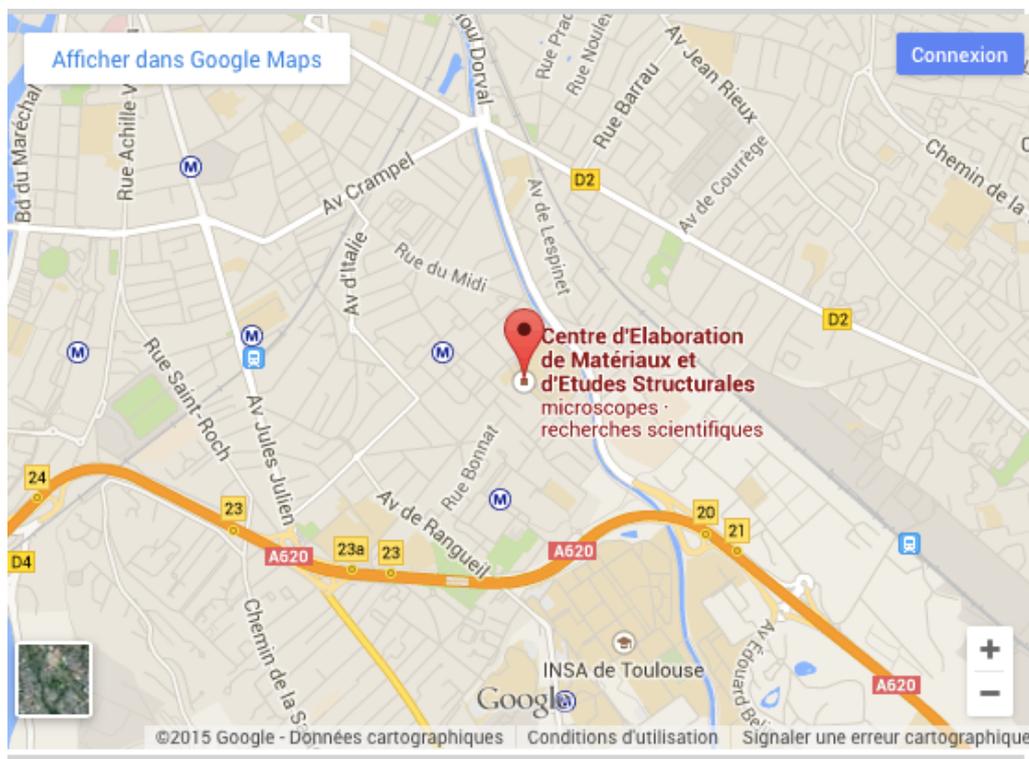
www.meca2000.fr

PLANS et ACCÈS

CEMES 29, rue Jeanne Marvig, BP 94347, 31055 Toulouse Cedex 4

Tél : +33 5.62 25.78.00

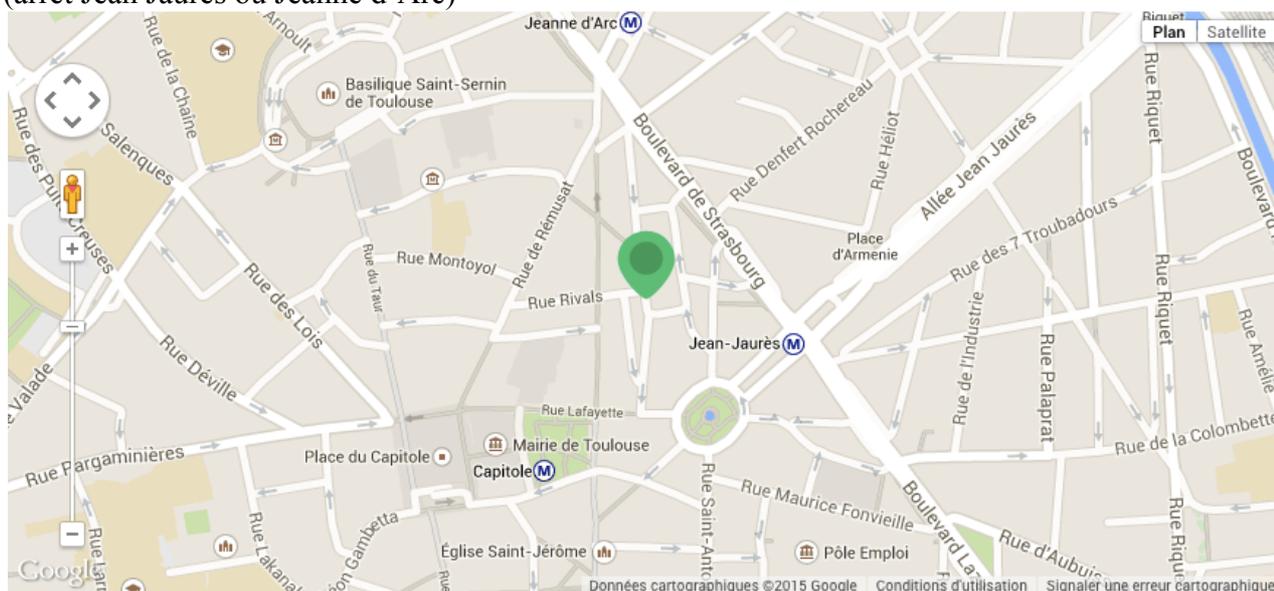
Le CEMES se trouve à quelques minutes à pied du métro ligne B, arrêt Saouzelong.



Plan d'accès au restaurant la Gourmandine (jeudi 29/01 à 20h)

www.la-gourmandine.fr/

17, place Victor Hugo 31000 Toulouse, tout près du métro ligne A (arrêt Jean Jaurès) ou ligne B (arrêt Jean Jaurès ou Jeanne d'Arc)



PROGRAMME

mercredi 28 janvier 2015

12:00 - 14:00	Accueil-Buffer
14:00 - 14:45	Propriétés magnétiques remarquables de l'interface Co/Ni(111) et application en spintronique - Stéphane Andrieu (IJL Nancy)
14:45 - 15:30	Magnétisme chiral aux interfaces de films ultra-minces - Stanislas Rohart (LPS, Orsay)
15:30 - 16:30	Pause café + Posters
16:30 - 17:15	Contrôler l'auto-organisation d'un film contraint - Jean-Noël Aqua (INSP, Paris)
17:15 - 18:00	Mobilité d'îlots sur une surface en condition de réaction chimique - Frédéric Leroy (CINaM, Marseille)

jeudi 29 janvier 2015

09:00 - 09:45	Vers une meilleure compréhension des mécanismes de croissance à l'échelle moléculaire de nanoparticules métalliques : approches combinées reposant sur l'expérience et la théorie – Jean-Yves Piquemal (ITODYS, Paris)
09:45 - 10:30	Modélisation de la ségrégation induite par l'adsorption de gaz : Cas de l'alliage Au(Pd) en présence de CO - Hazar Guesmi (ICG, Montpellier)
10:30 - 11:30	Pause café + Posters
11:30 - 12:15	Interfaces entre des solides d'oxydes et l'eau liquide étudiées par dynamiques moléculaires DFT-MD : structure, dynamique, acidité/basicité, spectroscopie vibrationnelle SFG - Marie-Pierre Gageot (LAMBE, Evry)
12:15 - 13:00	Mouillage à l'échelle nanométrique - Thierry Ondarçuhu (CEMES, Toulouse)
13:00 - 14:30	Déjeuner
14:30 - 15:15	Analyses locales de la déformation et des gradients de composition chimique par microscopie électronique en transmission - Bénédicte Warot-Fonrose (CEMES, Toulouse)
15:15 - 16:00	La spectroscopie de photoémission à pression proche de l'ambiante (NAP-XPS) : des surfaces du « monde réel » étudiées au synchrotron SOLEIL - Francois Rochet (LCPMR, Paris)
16:00 - 16:45	Pause café + Posters
16:45 - 17:30	Confinement de molécules à l'intérieur de nanotubes de carbone monofeuillets: organisation supramoléculaire et interactions physiques - Laurent Alvarez (L2C, Montpellier)
17:30 - 18:15	Electroluminescence d'un fil moléculaire suspendu dans une jonction STM - Guillaume Schull (IPCMS Strasbourg)
20:00 - 22:00	Dîner au restaurant la Gourmandine

vendredi 30 janvier 2015

09:00 - 09:45	Polarized Tamm plasmon lasers - Joël Bellessa (ILM, Lyon)
09:45 - 10:30	Piégeage cohérent d'atomes rapides sur une surface cristalline - Hocine Khemliche (ISMO, Orsay)
10:30 - 11:15	Pause café + Posters
11:15 - 12:00	Couches moléculaires sur silicium : greffage covalent et organisation - François Ozanam (LPMC, Palaiseau)
12:00 - 12:45	From Random to Controlled Nanowire Networks - Sébastien Plissard (LAAS, Toulouse)
13:00 - 14:30	Déjeuner

Contributions Orales

01 Propriétés magnétiques remarquables de l'interface Co/Ni(111) et application en spintronique

S. Andrieu¹, T. Hauet¹, L. Calmels², F. Bertran³, P. Le Fevre³, Ph. Ohresser³, A. Vlad³, Y. Garreau³, A. Resta³, A. Coati³,

¹ Institut Jean Lamour, Université de Lorraine /CNRS, BP239 54506 Vandœuvre-lès-Nancy ² CEMES, Université de Toulouse /CNRS, BP 94347, 31055 Toulouse cedex

³ Synchrotron SOLEIL-CNRS, Saint-Aubin, BP 48, 91192 Gif-sur-Yvette cedex,

Un des enjeux majeurs de la spintronique actuellement est de finaliser le concept de mémoire non volatile. En effet, si l'empilement de 2 couches magnétiques séparées par un espaceur non magnétique (conducteur ou pas) constitue la brique de base de la spintronique, il s'agit de manipuler l'aimantation d'une des couches magnétique de ce système à 2 états (aimantations parallèles ou anti-parallèles). La découverte de la rotation de l'aimantation par couple de transfert de spin en 1996 [1] via un courant polarisé fut sans conteste le dernier verrou scientifique afin d'aboutir au produit appelé STT-MRAM (Spin Transfer Torque – Magnetic Random Access Memory). La première démonstration fut réalisée en 2000 chez IBM [2], mais les courants nécessaires étaient alors trop grands ($>10^{12}$ A/m²). Depuis des améliorations considérables ont été apportées en particulier en travaillant avec des aimantations perpendiculaires aux couches (PMA pour Perpendiculaire Magnetic Anisotropy). Des progrès sont encore possibles en alliant PMA et forte polarisation du courant, c'est-à-dire forte polarisation en spin au niveau de Fermi. Nous allons montrer dans cette présentation que les superréseaux Co/Ni(111) présentent tous ces avantages : aimantation perpendiculaire due à la forte anisotropie magnétique interfaciale [3] et forte polarisation en spin sur le Co à l'interface avec Ni montrée par des expériences de photoémission résolue en spin au synchrotron SOLEIL (ligne CASSIOPEE). Les calculs ab initio confirment ces observations [4]. Des expériences de dichroïsme magnétique circulaire menées à l'ALS (USA) [3] et à SOLEIL (ligne DEIMOS) ont également permis de montrer que le moment magnétique de Co à l'interface avec Ni explose : 2.6 at contre 1.7 en volume (à basse température). Cependant, cette forte augmentation n'a pas été retrouvée par les calculs ab initio. Des expériences récentes de diffraction de surface en anormale (seuil K de Co) ont été menées à SOLEIL (ligne SIXS) afin de détecter une éventuelle structure particulière à l'interface pouvant expliquer ce désaccord. Les premiers dépouillements ne montrent pas d'anomalie particulière. Alors où est le problème ? Les mesures d'XMCD via l'application des règles de somme ? Les approximations dans les calculs ab initio ?

[1] J.C. Slonczewski. J. Mag. Mag. Mat. 159, L1 (1996), L. Berger, Phys. Rev. B 54, 9353 (1996)

[2] J.A. Katine, F.J. Albert, R.A. Buhrman, E.B. Myers & D.C. Ralph, Phys. Rev. Let. 84, 3149 (2000)

[3] M. Gottwald et al, Phys. Rev. B 86, 014425 (2012)

[4] F. Gimbert, L. Calmels, S. Andrieu, Phys. Rev. B 84, 094432 (2011)

O2 Magnétisme chiral aux interfaces de films ultra-minces

Stanislas Rohart

*Laboratoire de Physique des Solides, Université-Paris Sud, Batiment 510, 91405 Orsay Cedex *
stanislas.rohart@u-psud.fr*

ABSTRACT

L'observation en 2006 de textures d'aimantation chirales dans des films ultra-minces en contact avec une couche non magnétique à fort couplage spin-orbite a modifié en profondeur le nanomagnétisme¹. Connu depuis longtemps dans les matériaux volumiques présentant une absence de symétrie d'inversion cristallographique², ce n'est donc que très récemment que ce phénomène a été pris en compte aux interfaces, où l'absence de symétrie d'inversion est structurale³. L'interaction qui conduit à l'apparition de la chiralité, dite Dzyaloshinskii-Moriya², constitue un équivalent anti-symétrique à l'interaction d'échange dite Heisenberg.

Fondamentalement non colinéaire, l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya ouvre le magnétisme vers de nouveaux états, ni ferro ni antiferromagnétiques, où l'aimantation évolue continument sur des longueurs données par le rapport d'intensité entre interactions Heisenberg et Dzyaloshinskii-Moriya, pouvant aller de l'infini à quelques distances atomiques⁴. Parmi les conséquences les plus fascinantes, on note l'observation de skyrmions^{5,6}, sortes de nanobulle correspondant à un état topologique non-trivial (le passage du skyrmion à l'état uniforme ne peut se faire de manière continue, de même qu'il est impossible de défaire un nœud sur une corde de longueur infinie). Ces skyrmions, au-delà de leur intérêt fondamental pourrait aussi avoir une place dans de futures technologies de stockage de données et constituer le support ultime d'information à ultra haute densité⁷. Dans cet exposé, nous partirons des premières observations de textures chirales par microscopie à effet tunnel résolue en spin^{1,6} pour présenter ensuite les récents développements et notamment leur lien étroit avec progrès en électronique de spin⁷.

REFERENCES

1. M. Bode et al. Nature 447, 190 (2007)
2. I.E. Dzyaloshinskii Sov. Phys. JETP 5, 1259 (1957) ; T. Moriya Phys. Rev. 120, 91 (1960)
3. A. Fert and P. Levy Phys. Rev. Lett. 44, 1538 (1980) ; A. Fert Mater. Sci. Forum 59-60, 439 (1990)
4. I.E. Dzyaloshinskii Sov. Phys. JETP 20, 665 (1965)
5. A. Bogdanov and A. Hubert J. Magn. Magn. Mat. 138, 255 (1994)
6. S. Heinze et al. Nature Phys. 7, 713 (2011)
7. A. Fert et al. Nature Nano 8, 152 (2013)

O3 CONTROLER L'AUTO-ORGANISATION D'UN FILM CONTRAINT

Jean-Noël Aqua

INSP, 4 place Jussieu, Paris 5^e
aqua@insp.jussieu.fr

Lorsqu'un film cristallin est déposé sur un substrat de paramètre de maille différent, les contraintes élastiques générées peuvent donner lieu à une instabilité de surface dite d'Asaro-Tiller-Grinfeld. Elle se traduit aux temps longs par l'auto-organisation de boîtes quantiques avec une taille caractéristique. Si cette auto-organisation aboutit à des boîtes relativement désordonnées sur un substrat plan, la croissance sur un substrat patterné donne lieu expérimentalement à une auto-organisation dirigée où les boîtes se positionnent relativement à la morphologie du pattern. Un modèle dynamique rendant compte de l'évolution d'une surface induite par les interactions élastiques et les interactions de mouillage permet de décrire ces systèmes et de caractériser l'influence de la périodicité du pattern par rapport à la longueur caractéristique de l'instabilité. A l'inverse, la croissance du film sur un substrat souple et/ou pré-contraint peut permettre d'inhiber cette auto-organisation.

O4 Mobilité d'îlots sur une surface en condition de réaction chimique

F. Leroy¹, Y. Saito², F. Cheynis¹, E. Bussmann^{1,*}, O. Pierre-Louis³, P. Müller¹

¹ CINaM, UMR 7325 Aix-Marseille Université/CNRS, Marseille France

² Department of Physics, Keio University, Yokohama, Japan

³ ILM, UMR 5306 Université Lyon 1-CNRS, Villeurbanne, France

E-mail: leroy@cinam.univ-mrs.fr

Le mouvement spontané de gouttes liquides [1,2] ou d'îlots solides [3,4] sur des surfaces a connu récemment un regain d'intérêt en particulier dans la perspective de positionner des nanostructures. Plus spécifiquement les réactions chimiques [5] à l'interface entre un îlot et son substrat sous-jacent peuvent conduire à une variété de comportements hors-équilibre. En fonction du détail des mécanismes réactionnels interfaciaux, la diffusion peut être soit favorisée et conduire par exemple à un mouvement "auto-propulsé" de l'îlot ou au contraire être ralentie.

Par microscopie à électrons lents (LEEM) *in situ* et Microscopie à Force Atomique *ex situ* nous avons mené l'étude du mouvement hors-équilibre de particules 3D. J'aborderai deux exemples : Le mouvement de gouttes liquides d'Or sur des surfaces vicinales de Si et celui d'îlots solides de Si sur nous avons mis en évidence trois régimes : (i) Aux temps courts, les îlots de Si se déplacent aléatoirement sur le substrat par un mécanisme de diffusion de surface des ad-atomes de Si sur l'îlot. De façon concomitante, l'îlot commence à graver le substrat à la ligne triple Si/ gravure étant de plus en plus profonde, se développe ensuite (ii) un processus de diffusion de l'îlot piloté par la morphologie « modifiée » du substrat. Cette modification induit des déplacements erratiques de l'îlot résultant d'événements d'ancrage et de décrochage de la ligne triple. (iii) Aux temps longs, la profonde gravure induite dans le substrat piège l'îlot. Dans le cas de gouttes d'Or sur Si, nous avons montré que la mobilité des gouttes est induite par un processus de dissolution du substrat favorisant la formation d'un eutectique (K; composition ~ le joué par l'anisotropie de vitesse de dissolution des plans cristallins du substrat de Si et par les marches atomiques conduisent à une grande variété de mouvements auto-propulsés.

Remerciements : ANR 13 BS-000-402 grant LOTUS et JSPS KAKENHU 23540456.

References:

- [1] J. Tersoff, D. E. Jesson, and W. Tang, *Science* 324 (2009).
- [2] F. D. Dos Santos and T. Ondarçuhu, *Phys. Rev. Lett.* 75, 2972 (1995)
- [3] A. K. Schmid, N. C. Bartelt, and R. Q. Hwang, *Science* 290, 1561 (2000).
- [4] M. L. Anderson, N. C. Bartelt, P. J. Feibelman, B. S. Schwartzentruber, and G. L. Kellogg, *Phys. Rev. Lett.* 98, 096106 (2007).
- [5] U. Denker, A. Rastelli, M. Stoffel, J. Tersoff, G. Katsaros, G. Constantini, K. Kern, N. Jin-Phillip, D. Jesson, and O. Schmidt, *Phys. Rev. Lett.* 94, 216103 (2005).
- [6] F. Leroy, Y. Saito, F. Cheynis, E. Bussmann, O. Pierre-Louis, and P. Müller, *Non equilibrium diffusion of reactive solid islands*, *Phys. Rev. B* 89, 235406 (2014)

O5 Vers une meilleure compréhension des mécanismes de croissance à l'échelle moléculaire de nanoparticules métalliques: approches combinées reposant sur l'expérience et la théorie.

J.-Y. Piquemal,¹ C. Michel,² P. Sautet²

¹Université Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, ITODYS, CNRS UMR 7086, 15 rue J.-A. de Baïf, 75205 Paris Cedex 13, France. Contact : jean-yves.piquemal@univ-paris-diderot.fr

²Université de Lyon, CNRS, Institut de Chimie de Lyon, ENS Lyon, Laboratoire de Chimie, 46 Allée d'Italie, 69364 Lyon Cedex 07, France.

Il est indéniable que des progrès très importants ont été réalisés ces dernières années pour la préparation de nanoparticules de taille et de forme contrôlées. Ces progrès ont été motivés par le fait qu'à côté de la structure cristalline, de la taille et de la nature chimique des objets, l'habitus cristallin peut aussi avoir une influence considérable sur les propriétés recherchées, qu'elles soient magnétiques, optiques ou catalytiques. Les méthodes de synthèse par voie de solution, simples à mettre en œuvre, ont été largement utilisées et ont permis d'accéder à de très nombreuses morphologies telles que des cubes, des cuboctaèdres, des fils ou bâtonnets présentant des sections carrées, pentagonales ou octogonales ou encore des plaquettes à base triangulaire, hexagonale, etc.¹ Afin d'orienter la croissance des objets vers la morphologie désirée, le chimiste dispose d'une panoplie de ligands organiques à longue chaîne tels que des amines, des phosphines ou encore des carboxylates. Pour rendre compte du contrôle de la morphologie observé, l'hypothèse très souvent avancée est que ces ligands à longue chaîne s'adsorbent préférentiellement sur certaines faces cristallographiques en croissance, favorisant ainsi le développement de certaines faces au détriment d'autres.

Pour autant, l'optimisation de la taille et surtout de la forme des particules résulte bien souvent de processus d'essais-erreurs chronophages ou les différents paramètres expérimentaux (nature du précurseur et des additifs organiques, rampe de montée en température et température finale, etc.) sont variés de façon systématique de façon à déterminer les conditions de formation optimales des objets. La compréhension, à l'échelle de moléculaire, du rôle de ces ligands à longue chaîne dans la formation des particules s'avère capitale afin d'obtenir, à terme, un meilleur contrôle de leur structure et de leurs propriétés.

Dans cette présentation, nous montrerons, sur la base de plusieurs exemples, l'intérêt de faire appel aux méthodes et aux outils de la chimie théorique et de mener des études combinées alliant l'expérience et la théorie.²⁻⁵ L'examen des données de la bibliographie montre en effet que ce type d'approche est de plus en plus utilisée afin de mieux comprendre les mécanismes de nucléation-croissance, à la base de la formation des nanoparticules.

Références

1. Y. Xia, Y. Xiong, B. Lim, S. E. Skrabalak, *Angew. Chem. Int. Ed. Eng.*, **2009**, 48, 60.
2. A.-X. Yin, W.-C. Liu, J. Ke, W. Zhu, J. Gu, Y.-W. Zhang, C.-H. Yan, *J. Am. Chem. Soc.*, **2012**, 134, 20479.
3. N. Aguilera-Porta, M. Calatayud, C. Salzemann, C. Petit, *J. Phys. Chem. C*, **2014**, 118, 9290.
4. K. Aït Atmane, C. Michel, J.-Y. Piquemal, P. Sautet, P. Beaunier, M. Giraud, M. Sicard, S. Nowak, R. Losno, G. Viau, *Nanoscale*, **2014**, 6, 2682.

O6 Modélisation de la ségrégation superficielle induite par l'adsorption de gaz : application à l'alliage Au-Pd en présence de CO

Hazar Guesmi

*Institut Charles Gerhardt – UMR5253-Equipe MACS, ENSCM, 8, rue de l'École Normale,
34296 Montpellier*

En catalyse hétérogène l'optimisation des catalyseurs sous forme de nanoalliages bimétalliques est conditionnée par la maîtrise de la répartition des constituants sur la surface de ceux-ci pendant l'élaboration et dans les conditions de la réaction. Ainsi, la ségrégation superficielle, i.e. l'enrichissement de la surface par l'un des éléments de l'alliage, revêt une importance considérable. S'ajoute à cela la compréhension des phénomènes de ségrégation induite par la présence de réactifs (ou de molécules de gaz adsorbées sur la surface), c'est-à-dire lors du déroulement de la réaction. Le système Au-Pd illustre la complexité de ces phénomènes : sous vide, l'or a tendance à ségréger à la surface, alors que la ségrégation inverse, i.e. celle du palladium, a été observée expérimentalement [1-2] et prédite théoriquement [3-4] en présence de CO, O et Cette évolution des concentrations locales induit bien évidemment un changement de la réactivité des nanoalliages. Or, si les phénomènes de ségrégation superficielle dans les conditions du vide ont fait l'objet de nombreux travaux théoriques, il n'en va pas de même dans les conditions réactionnelles.

L'ambition de notre travail sur le système Au-Pd est de comprendre le phénomène de ségrégation du palladium en présence de gaz et de déterminer structure, concentration locale et ordre chimique à la surface des nanoalliages dans les conditions de la réaction.

Dans cet exposé nous présenterons la méthodologie développée pour modéliser la surface Au-Pd en présence de CO [5]. Par une approche combinant calculs ab initio intensifs et modèle d'Ising effectif paramétré sur ces calculs, nous avons pu mener des simulations Monte Carlo, permettant de prédire le profil de composition couche par couche à partir de la surface en fonction de la température, de la pression et de la composition de l'alliage.

[1] F. Gao, Y. Wang and D. W. Goodman, *J. Phys. Chem. C* 114 (2010) 4036.

[2] A. Hugon, L. Delannoy, J.M. Krafft and C. Louis, *J. Phys. Chem. C* 114 (2010) 10823.

[3] B. Zhu, G. Thrimurthu, L. Delannoy, C. Louis, C. Mottet, J. Creuze, B. Legrand and H. Guesmi, *J. Catal.* 308 (2013) 272.

[4] M. Sansa, A. Dhouib and H. Guesmi, *J. Chem. Phys.* 141 (2014) 064709.

[5] B. Zhu, J. Creuze, B. Legrand, C. Mottet, L. Delannoy, C. Louis and H. Guesmi, to be submitted.

O7 Interfaces entre des solides d'oxydes et l'eau liquide étudiées par dynamiques moléculaires DFT-MD : structure, dynamique, acidité/basicité, spectroscopie vibrationnelle SFG

Marie-Pierre Gaigeot

*LAMBE UMR8587 Laboratoire Analyse et Modélisation pour la Biologie et l'Environnement Université d'Evry val d'Essonne, Blvd F. Mitterrand, Bat Maupertuis
91025 EVRY*

*mgaigeot@univ-evry.fr
<http://mpgaigeot-research.fr/>*

Nous présentons notre activité théorique concernant la structure, dynamique, pKa, spectroscopie vibrationnelle non linéaire de type SFG (Sum Frequency Generation) d'interfaces entre oxydes et eau liquide par simulations de dynamique moléculaire ab initio DFT-MD (représentation électronique DFT).

Nous avons typiquement étudié les interfaces entre le quartz et l'eau liquide et entre l'alumine et l'eau liquide pour lesquelles l'organisation de l'eau interfaciale a été caractérisée dans le détail, les pKa des sites de surface des solides ont été calculés à l'aide de nos dynamiques DFT-MD, la relation entre pKa et organisation de l'eau à l'interface a été caractérisée, et les signatures vibrationnelles des molécules d'eau à l'interface ont été calculées et expliquées en fonction de leur organisation structurale et des liaisons hydrogène formées avec les sites (acides, basiques) des surfaces d'oxydes. L'interface silice amorphe/eau liquide a également été étudiée, et nous caractérisons ainsi l'influence d'une surface non cristalline sur les propriétés interfaciales de l'eau. Ces études se poursuivent avec la caractérisation des perturbations de ces interfaces en fonction du pH de la solution, et lorsque des électrolytes sont présents à l'interface.

Les méthodes employées ainsi que nos principaux résultats seront présentés.

O8 Mouillage à l'échelle nanométrique

Thierry Ondarçuhu^{*}, Laure Fabié, Mathieu Delmas, Julien Dupré de Baubigny
Groupe Nanosciences, CEMES-CNRS, 29 rue Jeanne Marvig, 31055 Toulouse cedex 4 * ondar@cemes.fr

Même si le mouillage de surfaces a été largement étudié, de nombreuses questions restent ouvertes, notamment celles concernant la structure et la dynamique de la ligne de contact, le bord de la goutte où coexistent les trois phases solide, liquide et vapeur. Ainsi, la dissipation dans le coin de la goutte qui gouverne la dynamique est mal connue, de même que l'ancrage sur les défauts de surface, à l'origine de l'hystérésis de l'angle de contact. Des réponses à ces questions nécessitent le développement de méthodes permettant de sonder les liquides à l'échelle nanométrique¹. Après un rapide tour d'horizon des questions ouvertes en physique du mouillage, nous montrerons que la microscopie à force atomique (AFM) peut amener de nouvelles approches pour aborder ces questions.

Dans un premier temps, nous présenterons une technique appelée NADIS² (liquid nanodispensing) qui permet de déposer et manipuler des gouttes jusqu'à des dimensions de 50 nm, et se pose comme une méthode unique pour l'étude du mouillage à l'échelle sub-micronique³⁻⁵ (Fig. 1).

Afin d'atteindre des dimensions réellement nanométriques, des pointes AFM modifiées à leur extrémité par un nanocone de carbone sont partiellement immergées à une interface liquide (Fig. 2). La mesure de la force capillaire permet une étude de l'ancrage de la ligne de contact sur des défauts nanométriques individuels à l'origine de l'hystérésis de l'angle de contact⁶. Nous présenterons également des résultats préliminaires sur la dynamique, obtenus en utilisant le mode FM-AFM qui permet une mesure quantitative des contributions conservative et dissipative de l'interaction pointe - liquide.

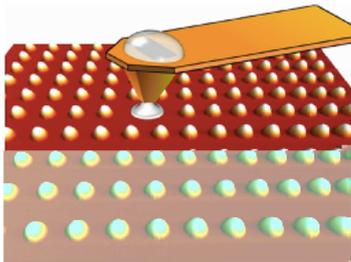


Fig. 1 : Image AFM d'un réseau de nanogouttes de diamètre 400 nm déposées par une pointe NADIS représentée schématiquement.

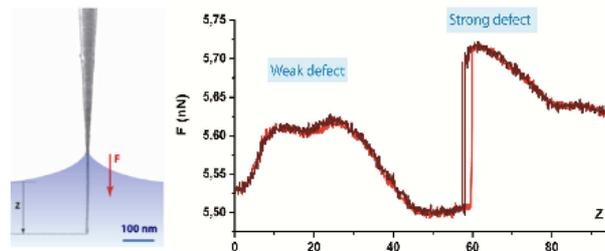


Fig. 2 : Représentation schématique d'un nanoménisque formé autour d'un nanocone de carbone et force capillaire mesurée lors du passage de la ligne de contact sur deux défauts de natures différentes.

REFERENCES

1. T. Ondarçuhu and J. P. Aime, eds., *Nanoscale liquid interfaces: wetting, patterning and force microscopy at the molecular scale*, Pan Stanford Publishing, Singapore, (2013).
2. A. P. Fang, E. Dujardin and T. Ondarçuhu, **Nano Lett.**, **6**, 2368-2374 (2006).
3. J. Arcamone, E. Dujardin, G. Rius, F. Perez-Murano and T. Ondarçuhu, **J. Phys. Chem. B**, **111**, 13020-13027 (2007).
4. L. Fabie, H. Durou and T. Ondarçuhu, **Langmuir**, **26**, 1870-1878 (2010).
5. L. Fabie and T. Ondarçuhu, **Soft Matter**, **8**, 4995-5001 (2012).
6. M. Delmas, M. Monthieux and T. Ondarçuhu, **Phys. Rev. Lett.**, **106**, 136102 (2011).

09 Analyses locales de la déformation et des gradients de composition chimique par microscopie électronique en transmission

Bénédicte Warot-Fonrose^{1*}, J.Nicolai^{1#}, C.Gatel¹, C.Magen², A.Ponchet¹, S.Matzen^{3‡},
J.-B. Moussy³

1 CEMES-CNRS, Toulouse, France

2 INA, Zaragoza, Espagne

3 CEA-Saclay, SPEC, France

actual address : Institut PPrime, Poitiers, France, ‡ : Univ. Paris 11, CNRS, IEF, Orsay, France

** warot@cemes.fr*

ABSTRACT

La détermination des contraintes à l'échelle locale est bien souvent indispensable dans les couches minces pour expliquer les propriétés magnétiques, électriques ou optiques. Les déformations peuvent être déterminées par microscopie électronique en transmission en mode haute résolution. Les méthodes d'analyse d'images permettent de mesurer ces déformations avec une résolution nanométrique, et ainsi de s'intéresser aux déformations au voisinage des interfaces. La formation de ces interfaces peut également induire des gradients de compositions chimiques. Les analyses locales de déformations sont donc associées à des mesures locales de composition chimique, par spectroscopie de pertes d'énergie des électrons notamment. L'étude du contraste chimique peut aussi s'effectuer par STEM-HAADF (high angle annular dark field) résolu atomiquement.

Un premier exemple concernera la corrélation entre le comportement magnétique et l'état de contrainte dans des couches de CoFe_2O_4 déposées sur $\text{MgAl}_2\text{O}_4(001)$ et (111) [1]. La ferrite de cobalt est une structure spinelle ferrimagnétique présentant une forte constante magnétoélastique. Une croissance pseudomorphe est observée sur $\text{MgAl}_2\text{O}_4(111)$ tandis qu'une forte compression est mesurée dans le plan pour une croissance sur $\text{MgAl}_2\text{O}_4(001)$. Ces deux états de contrainte conduisent à des propriétés magnétiques différentes.

La combinaison des analyses de contraintes et de composition chimique sera présentée sur des hétérostructures arséniures/antimoniures, systèmes prometteurs pour de nouveaux développements dans la photonique et l'électronique de semi-conducteurs dans le domaine infrarouge moyen (entre 2 et 5 μm). Par exemple, les multicouches InAs / AlSb déposées sur InAs ont été utilisées avec succès pour réaliser des lasers à cascade quantique (QCL) à courte longueur d'onde émettant en dessous de 3 μm .

Les propriétés électriques et optiques de ces hétérostructures sont fortement dépendantes de la qualité cristalline des couches. En particulier, les propriétés structurales de l'interface (gradients de contrainte, largeur des zones interfaciales, ...) sont très complexes en raison du changement des éléments du groupe III et du groupe V au niveau des interfaces. Le but de cette étude est de caractériser les propriétés de l'interface en fonction des séquences de croissance [2].

[1] C.Gatel, B.Warot-Fonrose, S.Matzen, J.-B.Moussy, Applied Physics Letters 103, 092405 (2013)

[2] J. Nicolai, C. Gatel, B. Warot-Fonrose, R. Teissier, A. Baranov, C. Magen, A. Ponchet, Applied Physics Letters, 104, 031907 (2014)

Ce travail a été soutenu par le projet ANR NAIADÉ (ANR-11-BS10-017) et le projet Européen d'Infrastructure Intégrée ESTEEM2 (contrat n°312483).

O10 La spectroscopie de photoémission à pression proche de l'ambiante (NAP-XPS) : des surfaces du « monde réel » étudiées au synchrotron SOLEIL

François Rochet

Sorbonne Universités, Université Pierre et Marie Curie, Laboratoire de Chimie Physique Matière et Rayonnement et Synchrotron SOLEIL.

La spectroscopie de photoémission induite par rayons X (XPS) est un outil puissant d'étude des surfaces, toutefois en raison de la diffusion inélastique des photoélectrons par les molécules de gaz, la XPS a surtout été utilisée dans des conditions d'ultra-haut vide (à des pressions $<10^{-9}$ mbar). En conséquence son application à l'étude des surfaces et interfaces « réelles » solide/gaz, solide/liquide et liquide/gaz a longtemps été rendu impossible. La construction d'un nouveau type de spectromètre de photoémission capable de fonctionner à des pressions proche de l'ambiante (20 mbar, NAP-XPS) est une avancée considérable. Initiée et développée au LBNL à Berkeley il y a une dizaine d'années, et présente aujourd'hui auprès de six centres de lumière synchrotron, la NAP-XPS a déjà donné des résultats remarquables dans le domaine de la chimie de l'environnement et de la catalyse. Depuis Janvier 2013, SOLEIL accueille la première machine de ce type en France. L'exposé donnera une description de l'installation de SOLEIL. Ses caractéristiques et potentialités seront illustrées par des expériences récentes réalisées par l'équipe du LCPMR dans des domaines variés (solutions salines, gonflement des argiles, ALD etc.).

011 Confinement de molécules à l'intérieur de nanotubes de carbone monofeuillets: organisation supramoléculaire et interactions physiques

L. Alvarez

Laboratoire Charles Coulomb (L2C), Université Montpellier 2, France Laurent.Alvarez@univ-montp2.fr

Un nanotube de carbone (NT) peut être envisagé comme un enroulement spécifique d'un plan de graphène sur lui-même. La géométrie hélicoïdale ainsi obtenue détermine sa structure moléculaire et par conséquent ses propriétés physiques. En particulier, les NTs sont soit métalliques soit semi-conducteurs selon leur angle d'enroulement et ils présentent des propriétés optiques qui dépendent de leur diamètre. Cependant, ces propriétés ne sont pas modulables.

Une méthode élégante pour contrôler et ajuster les propriétés opto-électroniques consiste à élaborer des nano-matériaux hybrides 1D par confinement de molécules dans la cavité des nanotubes. Nous présenterons ici les principaux résultats obtenus après insertion de molécules d'iode [1], d'oligothiophène [2] et de phthalocyanine [3]. Nous montrerons qu'il est possible, essentiellement par spectroscopie Raman, d'étudier les propriétés structurales des molécules encapsulées (organisation supramoléculaire et effets de confinement), la nature des interactions physiques permanentes (dispersive ou avec transfert de charge, entre molécules ou avec les NTs) et de mettre en évidence d'éventuels effets photo-induits.

[1] L. Alvarez et al, Phys. Rev. B, 82, 205403, (2010)

[2] Y. Almadori et al, J. Phys. Chem. C 2014, 118, 19462–19468

[3] L. Alvarez et al, J. Nanoelectron. Optoelectron. 8, 28-35 (2013)

O12 Propriétés optoelectroniques de jonctions atomiques et moléculaires

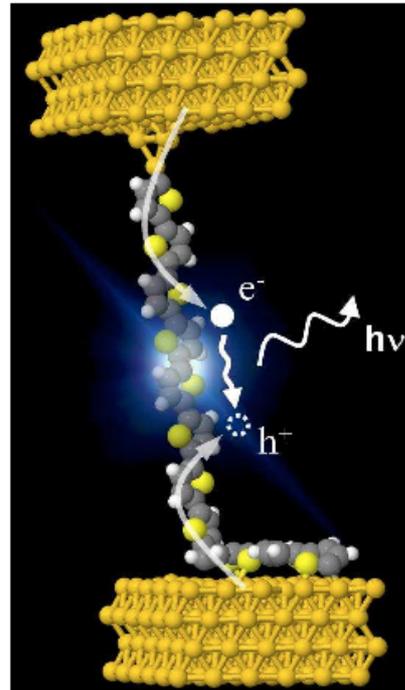
Guillaume Schull

Institut de physique et de chimie des matériaux de Strasbourg
<http://www-ipcms.u-strasbg.fr/stmipcms/>

L'étude du passage des électrons au travers de structures constituées d'un atome ou d'une molécule a révélé des aspects fascinants tels que l'observation d'une quantification de la conductance, la disparition du bruit de grenaille pour des contacts à un atome, ou la réalisation de chaînes d'atomes ou de molécules suspendues entre électrodes.

A l'aide d'un microscope à effet tunnel (STM) fonctionnant à des températures cryogéniques, nous avons démontré qu'il est possible de déterminer avec précision l'influence de la section [1], de la nature chimique [2] ou de la position [3] du contact entre une molécule unique et ses électrodes sur les propriétés de transport de la jonction.

Par la suite, nous avons étudié la lumière émise lors du passage du courant tunnel au travers de telles structures. Nous avons notamment mis en évidence l'influence du bruit de grenaille du courant sur l'émission de contacts à un atome [4]. Je présenterai également nos travaux les plus récents qui ont trait à l'électroluminescence de fils moléculaires suspendus entre la pointe et la surface du STM [5]. Dans ce cas, la lumière émise est associée à des recombinaisons électron-trou au sein du fil. Les résultats obtenus suggèrent une analogie entre les propriétés des ces jonctions moléculaires et le comportement des diodes électroluminescentes.



Electroluminescence
d'un fil moléculaire
suspendu dans une
jonction STM.

References:

- [1] G. Schull et al. Nature Nanotechnol. 6, 23 (2011).
- [2] T. Frederiksen et al. Nature Comm. 5, 3659 (2014)
- [3] G. Schull et al. Nanoletters 11, 3142 (2011).
- [4] N.L. Schneider et al. Phys. Rev. Lett. 105, 026601 (2010).
- [5] G. Reecht et al. Phys. Rev. Lett. 112, 047403 (2014).

013 Polarized Tamm plasmon lasers

Bellessa.J, Lheureux. G , Symonds.C , Azzini.S

*Institut Lumière Matière, UMR5306 Université Lyon 1-CNRS, Université de Lyon
69622 Villeurbanne cedex, France*

Plasmonic Tamm states are interface modes formed at the boundary between a distributed Bragg mirror and a metallic layer [1]. Their optical properties lie in between surface plasmons and microcavity photonic modes and make them very promising for new type of lasers. We will describe some features of semiconductor quantum wells coupled to extended Tamm modes, like strong coupling with the excitons and lasing [2]. The main advantage of the Tamm modes lies in the easy confinement of the mode which can be obtained only by structuring the metallic part of the structure, allowing a good control of the size and the emission polarization. The reduction of the mode volume leads to an efficient control of the spontaneous emission (increased beta factor), making Tamm confined structures well suited for single photon emitters and lasers. We demonstrate that confined Tamm plasmon modes can be advantageously exploited for the realization of new kind of metal/semiconductor lasers. Laser emission is studied for Tamm structures with various diameters of the metallic disks which provide the confinement. A reduction of the threshold with the size is observed [3]. The competition between the acceleration of the spontaneous emission and the increase of the losses leads to an optimal size, which is in good agreement with calculations. Polarization effects in asymmetrical Tamm structures will also be discussed.

[1] A. V. Kavokin, Phys. Rev. B 2005, 72, 233102

M. Kaliteevski, et al. Phys. Rev. B 2007, 76, 165415.

[2] C. Symonds, et al.. Appl. Phys. Lett. , Vol. 100, pp. 121122 (2012)

[3] C. Symonds et al., Nano Lett., 2013, 13 (7), pp 3179–3184

O14 Piégeage cohérent d'atomes rapides sur une surface cristalline

H. Khemliche*, M. Debiossac, A. Zugarramurdi, P. Lunca-Popa, A. Momeni, A.G. Borisov, and P. Roncin

Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay, UMR 8214 CNRS–Université Paris-Sud, Bât. 351, Université Paris-Sud, 91405 Orsay CEDEX, France

* hocine.khemliche@u-psud.fr

La diffraction d'atome rapides en incidence rasante, découverte relativement récemment, ouvre des perspectives nouvelles tant du point de vue des applications pour la croissance de couches minces [1,2] que pour l'étude des processus fondamentaux dans l'interaction particule-surface. Ce nouveau régime de diffraction (GIFAD pour *Grazing Incidence Fast Atom Diffraction*) utilise des atomes, typiquement He, à des énergies comprises entre 200 eV et plusieurs keV. Dans ces conditions, les sources de décohérence sont multiples (vibrations thermiques, excitations électroniques, transfert d'électrons) [3,4,5,6], mais leur effet peut être réduit pour des angles rasants typiquement inférieurs à 1°, ce qui correspond à des énergies dans la direction normale à la surface inférieures à 1 eV. Lorsqu'on diminue d'avantage cette énergie normale à des valeurs comparables à la profondeur du puits attractif du potentiel d'interaction He-surface (10 meV), ces processus de décohérence deviennent si improbables qu'il devient possible de piéger les atomes incidents dans les états liés du puits de potentiel tout en conservant la cohérence de phase. Des résultats ont ainsi été obtenus par diffraction d'atomes He entre 300-500 eV sur une surface clivée de LiF(100) [7]. Ils démontrent que, les atomes étant piégés dans la direction normale à la surface à environ 3 Å du dernier plan atomique, ils continuent de se déplacer dans la direction parallèle, à grande vitesse et de manière cohérente, sur des distances proches du micron.

Ces résultats, confortés par des calculs théoriques, nécessitent d'une part que la surface soit traitée comme un objet quantique et d'autre part que la densité de défauts en surface soit extrêmement faible.

¹ P. Atkinson, M. Eddrief, V. H. Etgens, H. Khemliche, M. Debiossac, A. Momeni, M. Mulier, B. Lalmi and P. Roncin ; *Appl. Phys. Lett.* 105, 021602 (2014)

² M. Debiossac, A. Zugarramurdi, H. Khemliche, P. Roncin, A. G. Borisov, A. Momeni, P. Atkinson, M. Eddrief, F. Finocchi, and V. H. Etgens; *Phys. Rev. B* 90, 155308 (2014)

³ P. Rousseau, H. Khemliche, N. Bundaleski, P. Soullisse, A. Momeni, and P. Roncin *J. Phys.: Conf. Ser.* 133, 012013 (2008)

⁴ J. R. Manson, H. Khemliche, and P. Roncin, *Phys. Rev. B* 78, 155408 (2008)

⁵ N. Bundaleski, H. Khemliche, P. Soullisse, and P. Roncin, *Phys. Rev. Lett.* 101, 177601 (2008).

⁶ J. Lienemann, A. Schüller, D. Blauth, J. Seifert, S. Wethekam, M. Busch, K. Maass, and H. Winter, *Phys. Rev. Lett.* 106, 067602 (2011)

⁷ M. Debiossac, A. Zugarramurdi, P. Lunca-Popa, A. Momeni, H. Khemliche, A. G. Borisov, and P. Roncin, *Phys. Rev. Lett.* 112, 023203 (2014).

O15 Couches moléculaires sur silicium: greffage covalent et organisation

François Ozanam

Laboratoire de Physique de la Matière Condensée, CNRS-École polytechnique, 91128 Palaiseau

La fonctionnalisation de la surface des solides à l'aide de couches moléculaires est depuis longtemps un enjeu important pour conférer à une surface des propriétés particulières, qu'elles soient actives ou passives. Beaucoup de stratégies ont été mis en œuvre, mais il y a souvent loin du schéma de principe d'une molécule portant un groupe moléculaire supposé apporter la fonction recherchée, idéalement liée à la surface et au sein d'une couche bien organisée et sans défaut, à la réalité où la molécule est accrochée au sein d'une couche imparfaitement organisée, dans une conformation plus ou moins idéale et conférant plus ou moins efficacement à la surface la propriété recherchée.

Depuis plusieurs années, nous développons au sein de notre équipe des techniques de greffage sur des surfaces de silicium cristallin par des procédés en phase liquide. Nous caractérisons les surfaces obtenues par imagerie microscopique et analyse spectroscopique quantitative. Deux systèmes modèles seront présentés : les couches non fonctionnelles d'alkyles, et les couches portant une terminaison acide (couches carboxy-alkyles). Les greffages covalents sur une surface vierge d'oxyde sont en principe susceptibles de permettre l'obtention de couches compactes et régulières sur des surfaces idéalement préparées. Il est possible par microscopie à force atomique de s'assurer que les couches obtenues sont bien des monocouches moléculaires assurant une couverture régulière de la surface, et de déterminer par spectroscopie infrarouge la concentration superficielle de ces molécules. Toutefois, ces couches ne sont pas exemptes de défauts, comme le montrent leur faculté de protéger plus ou moins efficacement de l'altération des propriétés électroniques de la surface de silicium sous-jacente.

Un autre aspect concerne la façon de disperser plus ou moins homogènement des molécules fonctionnelles au sein d'une couche non fonctionnelle. Cette capacité intéresse de nombreux cas pratiques où l'on souhaite moduler la distance entre des centres fonctionnels au sein d'une couche moléculaire. Cet aspect sera abordé une fois encore au travers du système couche mélangée alkyle/carboxy-alkyle. Dans ce système, les inhomogénéités chimiques à grande échelle peuvent être mises en évidence par le contraste de phase en microscopie atomique en mode oscillant ; la corrélation de ces données avec l'analyse quantitative par spectroscopie infrarouge donne une première image de l'organisation de la couche moléculaire. Une image plus locale peut être obtenue en étudiant les décalages vibrationnels associés aux interactions dipolaires entre vibreurs. Dans ce contexte, il sera montré qu'en fonction du mode de greffage choisi, on peut obtenir des couches mélangées de façon homogène ou d'autres présentant des séparations de phases à différentes échelles.

O16 From Random to Controlled Nanowire Networks

Sébastien Plissard

sebastien.plissard@laas.fr

*Laboratoire d'analyse et d'architecture des systèmes, 7, avenue du Colonel Roche BP 54200
31031 Toulouse cedex 4, France*

ABSTRACT

Signatures of Majorana fermions have recently been reported in an InSb single-nanowire device. [1,2] In order to prove the non-abelian properties of Majorana fermions, it is necessary to perform logical operations by interchanging the positions of the two Majoranas.[3] This is not possible in a single InSb nanowire; Majorana fermion is its own antiparticle so when two Majoranas meet they annihilate. Therefore, more complex structures are needed.

We have investigated the formation of X- and T- shaped InSb nanowires from an early random process, to a controlled one. Depending on the meeting angle of the two wires, these structures can be single crystalline. We are now developing a method to increase the yield of single-crystalline crosses. With this method we can also make nanowire networks. First electrical measurements done on these nanostructures will be discussed. Hall effect measurements at low temperature prove the high quality of these new structures.

REFERENCES

- [1] V. Mourik; K. Zuo; S. M. Frolov; S.R. Plissard; E. P. A. M. Bakkers; L. P. Kouwenhoven *Science* 2012, 336, 1003
- [2] S.R. Plissard; D. R. Slapak, M. A. Verheijen; M. Hocevar; G. W. G. Immink; I. van Weperen; S. Nadj-Perge; S. M. Frolov; L. P. Kouwenhoven; E. P. A. M. Bakkers *Nano Lett.* 2012, 12, 1794
- [3] J. Alicea¹, Y. Oreg, G. Refael, F. von Oppen and M. P. A. Fisher, *Nature Physics* 2011, 7, 412

Contributions Posters

P1 ROLE OF INTERFACE ON THERMAL PROPERTIES OF COPPER/DIAMOND COMPOSITE MATERIALS

J.F. Silvain^{1,2,*}, T. Guillemet¹, J.M. Heintz¹, Y.F. Lu²

P2 On The Early Growth Stages of Sputter-Deposited Pd Films

J.J. Colin¹, A. Michel¹, G. Abadias¹, C. Jaouen¹

P3 L'interface nanoparticule d'or - antibiotique à l'échelle atomique

Nathalie Tarrat^{1,*}, Magali Benoit¹ et Marie-José Casanove¹

P4 Etude et contrôle des mécanismes de démouillage à l'état solide : le cas des systèmes SOI et GOI

F. Leroy, F. Cheynis, T. Passanante, S. Curiotto, P. Müller

P5 Preparation and characterization of fonctionnalized hydroxyapatite from Tunisian phosphates rok

Béchir Badraoui^{1,2,*}, Hassen Bachoua¹, Guillaume Renaudin³, Jean- Marie Nedelec³, Fabrice Leroux³

P6 Contribution à l'étude physico-chimique des hydroxyapatites mixtes calcium-magnésium: Réactivité de la surface apatitique greffée par l'acide glutamique

Béchir Badraoui^{1,2,*}, Sana Ben Moussa², Hassen Bachoua²

P7 Reconstruction atomique de la surface (111) du niobium

M. Drouet ^{1,*}, C. Coupeau¹, J. Durinck¹, B. Douat¹, J. Bonneville¹, J. Colin¹ et J. Grilhé¹

P8 Analyse de l'interface entre le silicène et le substrat d'Ag(111): étude DFT

Philippe Sonnet^{1,*}, Régis Stephan¹ and Marie-Christine Hanf¹

P9 Molecular chemisorption on boron doped silicon surfaces: DFT study

Philippe Sonnet^{1,*}, Khaoula Boukari¹ and Eric Duverger²

P10 DFT-D study of the cycloaddition reaction on boron doped silicon surfaces

Ph. Sonnet^{1,*}, K. Boukari¹, E. Duverger² and L. Stauffer¹

P11 Modélisations DDA et mesures LSPR de l'oxydation de nanoparticules de cuivre

Jérémy Cure^{1,2,*}, Arnaud Glaria², Yannick Coppel², Adnen Mlayah³, Bruno Chaudret⁴, Pierre Fau²

P12 Enrobage de Particules de Fer pour l'Hyperthermie en Milieu Biologique.

Arnaud Glaria¹, Wilfried Sojo Ojo¹, Sébastien Lachaize^{1,*}, Fabien Delpech^{1,*}, Bruno Chaudret¹, Céline Nayral^{1,*}, Nicolas Hallali¹, Reasmey Tan¹ et Julian Carrey¹

P13 Optical determination of the plasmonic responses and shape distribution of colloidal metallic nanoparticles

A.RESANO-GARCIA, Y.BATTIE, S.AKIL, N.CHAOUI, A.EN NACIRI*

P14 SrTiO₃/GaAs epitaxial templates: role of Ti at the interface, and application to the fabrication of novel opto-mechanical devices

B.Meunier^{1,*}, R. Bachelet¹, G. Grenet¹, C. Botella¹, P. Regreny¹, L. Largeau², J. Penuelas¹ and G. Saint-Girons¹

P15 Nanoparticules à transition de spin : effets de surface et modélisation

Mirko Mikolasek^{1,2}, Haonan Peng¹, Gautier Félix^{1,2}, Gábor Molnár¹, Lionel Salmon¹, William Nicolazzi^{1,*} et Azzedine Bousseksou¹

P16 Analyse des interfaces dans des antimoniures d'éléments III : nano-caractérisation et modélisation

M. Vallet^{1,*}, Y. Claveau¹, C. Gatel¹, B. Warot¹, H. Tang¹, R Teissier², A. Baranov² et A. Ponchet¹

P17 Pt sur Gd₂O₃(111)/ Si(111) : une étude XPS/XPD

D. Ferrah¹, M. El Kazzi¹, G. Niu¹, C. Botella¹, J. Penuelas¹, Y. Robach¹, L. Louahadj¹, R. Bachelet¹, L. Largeau², G. Saint- Girons¹, Q. Liu¹, B. Vilquin¹, G. Grenet^{1,*}

P18 "Monopôles" Magnétiques Chiraux Dans Les Glaces De Spin Artificielles

Y. Perrin^{1,2,*}, N. Rougemaille^{1,2}, F. Montaigne³, B. Canals^{1,2}, M. Hehn³, H. Riahi³, D. Lacour³, J.-C. Toussaint^{1,2}, O. Fruchart^{1,2} et E. Wagner^{1,2}

P19 Non-Universality Of Artificial Frustrated Spin Systems

I. A. Chioar^{1,2,*}, N. Rougemaille^{1,2}, A. Grimm^{1,2}, O. Fruchart^{1,2}, E. Wagner^{1,2}, M. Hehn³, D. Lacour³, F. Montaigne³ and B. Canals^{1,2}

P20 Processes And Factors Influencing The Intercalation Between Graphene And Iridium

S. Vlaic^{1,2,*}, A. Kimouche^{1,2}, J. Coraux^{1,2}, B. Santos³, A. Locatelli³ and N. Rougemaille^{1,2}

P21 Perpendicular Magnetic Anisotropy Of Cobalt Films In Contact With Graphene

N. Rougemaille^{1,2,*}, A. T. N'Diaye³, J. Coraux^{1,2}, C. Vo-Van^{1,2,,}O. Fruchart^{1,2} and A. K. Schmid³

P22 Molecules affect charge transport in nano-particle self-assemblies, at room température

Simon Tricard^{1,*} and Bruno Chaudret¹

P23 Couches minces photochromiques Ag/TiO₂ synthétisées par pulvérisation magnétron sur substrats flexibles

D. K. Diop^{1,2}, L. Simonot¹, N. Destouches², F. Pailloux¹, P. Guérin¹, G. Abadias¹ et D. Babonneau^{1,*}

P24 Au/Alkanethiols/GaAs(001): Growth, Homogeneity And Electronic Properties At The Nanoscale

A. Junay^{*}, S. Guézo, F. Solal, P. Turban, G. Delhaye, S. Ababou-Girard

P25 Etude de surfaces vicinales de saphir par diffusion centrale des rayons X sous incidence rasante et microscopie à force atomique

Elsa Thune^{1*}, Caroline Matringe¹, René Guinebretière¹, David Babonneau²

P26 Interaction électronique entre le graphène dopé et des molécules de porphyrines

J. Lagoute^{1,*}, V. D. Pham¹, O. Mouhoub¹, F. Joucken², V. Repain¹, C. Chacon¹, A. Bellec¹, Y. Girard¹, et S. Rousset¹

P27 Observation De Macromolécules De Type Substances Humiques Par AFM

Céline Martias^{*1}, Agnès Smith¹, Elsa Thune¹, Nicolas Villandier², Vincent Gloaguen²

P28 Structural Transitions in Supported Co-Ag Nanoalloys revealed by Element-selective Investigations

A. Lemoine^{1, 2}, A. Coati², Y. Garreau^{2,3}, C. Andreazza-Vignolle¹, J. Creuze⁴, B. Legrand⁵, P. Andreazza^{1*}

P29 Le Champ Électrique à l'Interface MgO/eau

Sara Laporte^{1*} et Marco Saitta¹

P30 Functionalized Graphene Nanoporous Network As An Organic Topological Insulator

A. Hallal^{1,2,*}, J. Landers^{1,2}, J. Coraux^{1,2}, M. De Santis^{1,2}, N. Bendiab^{1,2}, S. Lamare³, L. Magaud^{1,2} and F. Chérioux³.

P31 Theory Of Ballistic Electron Emission Microscopy

Yann Claveau^{1,*}, S. Di Matteo², P. De Andres³, F. Flores⁴

P32 In situ X-ray scattering investigations on SiGe nanowires: growth, strain and dance

Gilles RENAUD¹, Valentina CANTELLI¹, Olivier ULRICH¹, Olivier GEAYMOND² and Nils BLANC²

P33 Étude expérimentale et théorique de la migration de joints de grains couplée à un cisaillement

Armin Rajabzadeh, Marc Legros,

P34 Caractérisation de jauges de contrainte à nanoparticules par diffusion de rayons X aux petits angles couplée à des mesures électromécaniques

Lucas Digianantonio,¹ Mélanie Gauvin,¹ Nicolas Decorde,¹ Neralagatta M. Sangeetha,¹ Thomas Alnasser,¹ Benoit Viallet,¹ Guillaume Viau,¹ Jérémie Grisolia,¹ Alessandro Coati,² Alina Vlad,² Yves Garreau,^{2,3} et Laurence Ressier,^{1,*}

P35 Nanofils d'or ultrafins : mécanisme de croissance et étude de stabilité

L.-M. Lacroix,^{1,*} M. Impéror-Clerc,² R. Arenal,³ L. Ressier,¹ G. Viau¹

P36 SurfER: une extension originale pour la résonance magnétique électronique sous UHV

Jean-Louis Cantin^{1,*}, Marie d'Angelo¹, Jürgen von Bardeleben¹

P37 Propriétés mécaniques et structurales des encapsulants polymères utilisés en microélectroniques : effets de la température et de l'humidité

AYCHE Kenza^{1,*} Nicolas DELORME¹, Jean François BARDEAU¹, Pascal RUELO¹, Jean François PILARD¹

P38 Dissolution and oxidation process of a silicene layer forming a (2√3x2√3)R30° and a (4x4) structure on Ag(111).

H. Maradj^{1,2}, B. Parditka^{3,4}, J-Y. Hoarau¹, B. Ealet¹, H. Jamgotchian¹, J-P. Bibérian¹, M. Ghamnia², and B. Aufray¹

P39 A novel method to study bio-available silver released from a layer of AgNPs embedded in silica matrix

A. Pugliara^{1,2*}, K. Makasheva², B. Despax², M. Bayle¹, R. Carles¹, P. Benzo¹, G. BenAssayag¹, B. Pécassou¹, M.-C. Sancho³, E. Navarro³, Y. Echegoyen⁴ and C. Bonafos¹

P40 High-k stacked dielectrics for non-volatile memory application

L. Khomenkova^{1,5}, P. Normand², P. Dimitrakis², E. Kapetanakis², M. Carrada¹, F. Gourbilleau³, A. Slaoui⁴, C. Bonafos¹

P41 PREPARATION DE MATERIAUX POREUX A PARTIR D'EMULSIONS

A. HAMBARDZUMYAN^{1*}, T. DEVERS^{1,2}, F. MEDUCIN¹, S.GUILLOT¹,

P42 Influence de l'adsorption d'une couche d'alkanethiols sur le magnétisme d'un film de cobalt

P. Campiglio, R. Breitwieser, V. Repain, C. Chacon, A. Bellec, J. Lagoute, Y. Girard, et S. Rousset

P43 Enhanced magnetism in Gr/Co/Ir systems: an interplay of graphene and high temperatures

I. Carlomagno^{1,2}, J. Drnec², S. Vlaic³, H. Isern², R. Felici², N. Rougemaille³ and J. Couraux³

P44 Emergence of chirality in hexagonally packed monolayers of hexapentyloxytriphenylene on Au(111): a joint experimental and theoretical study

Piotr Slezczkowski, ^{1, 2} Nathalie Katsonis,² Oleksiy Kapitanchuk,³ Alexandr Marchenko,⁴ Fabrice Mathevet,⁵ Bernard Croset¹, and Emmanuelle Lacaze¹,

P45 Chemical Vapor Deposition of diamond by array of microwave sources: nano and ultra-nano crystalline diamond

Olivier Antonin^{1,2 *}, Ines Martinko², Yannick Engelmann², Patrice Raynaud^{2,3}, Thomas Nelis¹

P1 ROLE OF INTERFACE ON THERMAL PROPERTIES OF COPPER/DIAMOND COMPOSITE MATERIALS

J.F. Silvain^{1,2,*}, T. Guillemet¹, J.M. Heintz¹, Y.F. Lu²

¹ ICMCB-CNRS, Université Bordeaux 1, Pessac, 33608, France

² College of Engineering, University of Nebraska-Lincoln, Lincoln, United States *silvain@icmcb-bordeaux.cnrs.fr

ABSTRACT

Matrix / reinforcement interfaces in particle-reinforced composite materials are critical since they rule the load (thermal, mechanical) transfer process between the two components of the material. For thermal management of electronic packages, what matters is a high thermal conductivity, limiting the temperature increase in the module, and a coefficient of thermal expansion that is compatible with the other materials of the device, thus preventing the creation of excessive thermo-mechanical stresses.

Diamond is an interesting material to address thermal management issues since it combines in an unique way a high thermal conductivity ($\lambda = [800-2000] \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$) and a low coefficient of thermal expansion ($\alpha = 1 \times 10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$). Therefore, diamond is an ideal candidate to be used as reinforcement in a thermal package substrate material such as a copper matrix, which leads to diamond reinforced copper matrix (Cu/D) composite materials with tunable thermal performances and ductile properties. However, the non-reactive copper/carbon interface is critically detrimental to the thermal properties of Cu/D materials. Carbide forming additives, such as chromium or boron are traditionally employed to chemically bond copper and diamond. However, these carbide interphases might affect the resistance of the composites upon thermal cycling and decrease the module lifetime.

In this study, the thermal performances of traditional carbide-bonded Cu/D composite materials (Cu-B/D, Cu-Cr/D) were compared to that of Cu/D composites processed through an innovative bonding solution (Cu-Cu/D) which consists in depositing copper particles onto the diamond reinforcements prior to sintering through chemical and thermal treatments (Figure 1). The copper submicronic particles deposited onto the diamond powders act as strong chemical bonding agents between the diamonds and the copper matrix during densification. The as-fabricated Cu/D composites exhibit promising thermal performances, associating a thermal conductivity of $480 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ to a coefficient of thermal expansion of $12 \times 10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ with a diamond volume fraction of 40 %. Moreover, Cu-Cu/D composites exhibit significantly higher resistance to thermal cycling relative to Cu-B/D and Cu-Cr/D composites, which is a critical point in the scope of an application as heat-dissipative materials for cooling of electronic packages.

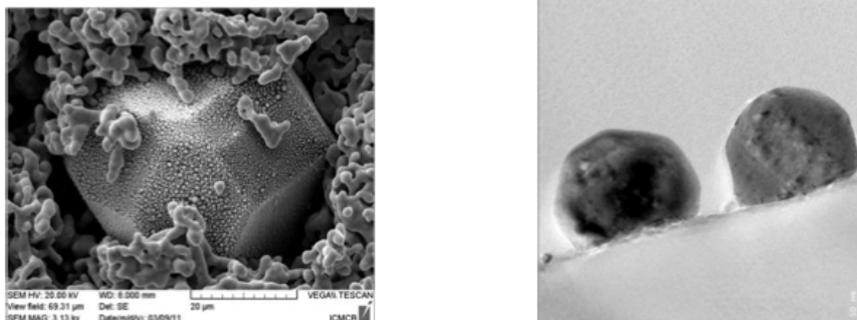


Fig. 1. SEM micrograph (left) and TEM micrograph (right) of a diamond reinforcement coated with copper submicronic particles (after chemical and thermal treatments, and prior to hot pressing).

P2 On The Early Growth Stages of Sputter-Deposited Pd Films

J.J. Colin¹, A. Michel¹, G. Abadias¹, C. Jaouen¹

¹Institut Pprime, Dpt. Physique et Mécanique des Matériaux, Université de Poitiers-CNRS-ENSMA, SP2MI, Téléport 2, 86962 Chasseneuil-Futuroscope, France

Corresponding author: jonathan.colin@univ-poitiers.fr

ABSTRACT

Metal silicide thin films are of technological relevance in silicon-based microelectronics devices, as they are largely used as ohmic contacts, Schottky barrier contacts, gate electrodes, or diffusion barriers. The mechanisms of silicide formation at the metal-silicon interface are relatively complex and depend on the nature of the metal as well as substrate orientation. Pd-Si is a model system because of the formation of a single silicide phase, diffusing species and study the growth kinetics as well as stress development/relaxation processes during solid state reaction; however, the growth dynamics and stress build-up during thin film deposition of Pd on Si remain still largely unexplored.

In the present work, we have used in situ and real-time multiple beam optical stress sensor (MOSS), combined with ex-situ (XRD, AFM, TEM) structural characterization, to investigate the early growth stages of sputter-deposited Pd thin films. The nucleation conditions were amorphous a-Si (2 to 20 nm) or chemically etched with dilute HF. We also deposited Pd/Si and Pd/Ge multilayers to highlight the role of the interfaces. The influence of substrate temperature, up to 200°C, will be also discussed.

From the non-monotonous stress evolution recorded at room temperature (RT), different growth regimes have been evidenced (see fig.1): a 3D growth mode (islands nucleation and steady-state growth of pure Pd for films grown on a-Si. In all cases, the Pd films are strongly (111)-textured, the lowest mosaicity (2.2°) being surprisingly obtained on a-Si. XRD occurs at RT. At higher substrate temperature, competition between interfacial silicide formation and growth of fcc Pd takes place, the former process being limited by the initial thickness of a-Si layer.

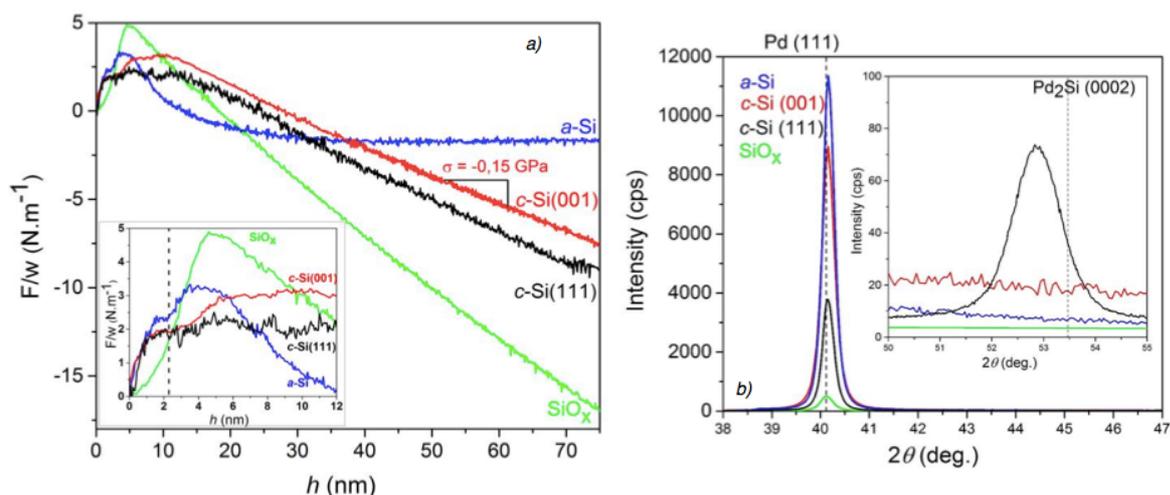


Figure 1: a) Film force evolution during sputter deposition of Pd on Si(001) and c-Si(111). b) Corresponding XRD patterns recorded on ~80nm thick films.

P3 L'interface nanoparticule d'or - antibiotique à l'échelle atomique

Nathalie Tarrat^{1,*}, Magali Benoit¹ et Marie-José Casanove¹

¹ CEMES-CNRS, 29 Rue Jeanne Marvig, 31055 Toulouse * nathalie.tarrat@cemes.fr

RESUME

A l'heure actuelle, des souches multi-résistantes de bactéries pathogènes apparaissent avec une fréquence croissante. De nouveaux mécanismes de résistance sont apparus, rendant la dernière génération d'antibiotiques inefficace. Nous sommes donc confrontés à un besoin urgent de systèmes antibactériens alternatifs. Très récemment, il a été montré que des nanoparticules d'or (AuNPs) conjuguées à des antibiotiques (nano-conjugués) sont des agents bactéricides puissants présentant des propriétés uniques allant jusqu'à contourner les mécanismes de résistance aux antibiotiques existant dans des souches de bactéries multi-résistantes [1]. De plus, la résistance aux AuNPs conjuguées à des antibiotiques se développe beaucoup plus lentement qu'à l'encontre de la dernière génération de molécules commerciales [2]. Dans ce contexte, la question qui est maintenant à l'ordre du jour est la modélisation primaire de nanoparticules conjuguées présentant les propriétés désirées et le développement ultérieur d'une procédure de synthèse des nanostructures théoriquement prédites.

Les propriétés biologiques des AuNPs sont basées sur leur taille, leur forme et leurs surfaces *i.e.* sur leurs propriétés structurales. En effet, la plupart des nanoparticules métalliques ne sont pas des sphères dures, mais des cristaux présentant des facettes et des bords bien définis. Ainsi, lorsqu'une molécule interagit avec une nanoparticule cristalline, différentes liaisons covalentes (ou non) peuvent former entre elles, et ceci en fonction de la topologie de la surface. Ces liaisons résultent d'un partage ou d'un transfert d'électrons entre les atomes participants. Le comportement des AuNPs en milieu biologique est donc largement dicté par la capacité de leurs surfaces à se lier électroniquement à différentes molécules. Cependant, en dépit de l'importance de ces effets électroniques, les efforts visant à les caractériser et à les contrôler restent rares.

Dans cette affiche, nous présentons les résultats de calculs DFT réalisés sur des modèles d'interfaces nanoparticule d'or – antibiotique, dans lesquels sont prises en compte les forces de van der Waals (vdw-DF). Tout d'abord les performances de cette méthode de simulation sont évaluées sur l'or massif et les surfaces (111), (110) et (100) libres. Par la suite, nous décrivons les différents modes d'adsorption de l'ampicilline, un antibiotique de la famille des bêta-lactames, ainsi que les énergies d'adsorption associées, sur ces trois facettes de l'or.

REFERENCES

1. X. Li, S. M. Robinson, A. Gupta, K. Saha, Z. Jiang, D. F. Moyano, A. Sahar, M. A. Riley, V. M. Rotello, *ACS Nano* 8, 10682-10686 (2014).
2. J. Bresee, C. M. Bond, R. J. Worthington, C. A. Smith, J. C. Gifford, C. A. Simpson, C. J. Carter, G. Wang, J. Hartman, N. A. Osbaugh, R. K. Shoemaker, C. Melander, D. L. Feldheim, *JACS* 136, 5295-5300 (2014).

P4 Etude et contrôle des mécanismes de démouillage à l'état solide : le cas des systèmes SOI et GOI

F. Leroy , F. Cheynis, T. Passanante, S. Curiotto, P. Müller

*CINaM, Aix Marseille Université, UMR CNRS 732, Campus de Luminy, 13288 Marseille Cedex
leroy@cinam.univ-mrs.fr*

ABSTRACT

Si les mécanismes de démouillage à l'état liquide (c'est-à-dire l'agglomération spontanée d'un film liquide en gouttelettes) sont bien connus, il n'en est pas de même des mécanismes de démouillage à l'état solide (agglomération d'un film solide métastable en une assemblée d'îlots tridimensionnels cristallisés). En particulier, les modèles permettant de décrire le démouillage liquide font appel à la capillarité des liquides (isotropes par définition) et à l'hydrodynamique alors que le démouillage solide est un phénomène capillaire dans lequel l'anisotropie cristalline joue un rôle important et pour lequel les transferts de masse sont, de fait, pilotés par la diffusion de surface.

L'utilisation de la microscopie à électrons lents (LEEM) nous a permis d'étudier la morphologie et la cinétique *in situ* et en temps réel du démouillage de films de Si/ SOI [1] et de Ge) [2]. Nous avons analysé le rôle central du facettage, de l'anisotropie cristalline et des processus de formation du bourrelet de démouillage. Nous montrons en particulier que les différences entre le démouillage de SOI et celui de GOI sont essentiellement dues à l'existence de facettes de type $\{15\ 3\ 23\}$ présentes sur la forme d'équilibre du Ge.

L'un des buts ultimes est de pouvoir contrôler le démouillage. Nous montrerons comment le démouillage à partir de fronts lithographiés permet un contrôle de la distribution des îlots issus du démouillage et comment il est possible de ralentir ou d'accélérer de façon réversible la dynamique du démouillage par adsorption étrangère ou oxydation réactive [3].

REFERENCES

1. F. Cheynis, E. Bussmann, F. Leroy, T. Passanante, P. Müller, Phys. Rev. B 84, 245439 (2011).
2. F. Leroy, F. Cheynis, T. Passanante, P. Müller, Phys. Rev. B 88, 035306 (2013).
3. S. Curiotto, F. Leroy, F. Cheynis, P. Müller, Appl. Phys. Lett. 104, 061603 (2014).

P5 Preparation and characterization of fonctionnalized hydroxyapatite from Tunisian phosphates rok

Béchir Badraoui^{1,2}, Hassen Bachoua¹, Guillaume Renaudin³, Jean- Marie Nedelec³,
Fabrice Leroux³

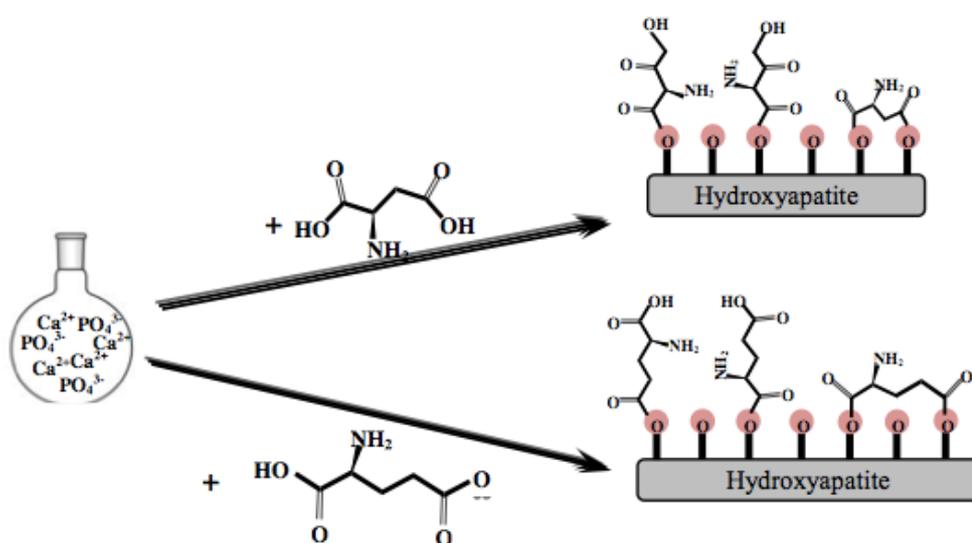
1 Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux, Université de Monastir, Faculté des Sciences, 5019 Monastir, Tunisie

2 Institut Préparatoire aux Etudes d'Ingénieur de Monastir, Université de Monastir, 5019 Monastir, Tunisie

*3 Laboratoire des Matériaux Inorganiques, Clermont Université, ENSCCF, BP 10448, 63000 Clermont-Ferrand, France *emai: badraoui_b@yahoo.fr*

ABSTRACT

Calcium hydroxyapatite-aspartic acid (CaHAp-Asp) and calcium hydroxyapatite-glutamic acid (CaHAp-Glu) hybrid materials have been prepared by the dissolution of Tunisian phosphate rocks in concentrate nitric acid and re-precipitation of the solution in the basic medium in presence of aspartic and glutamic acid. Chemical analyses, X-ray powder diffraction patterns, IR, NMR-MAS spectroscopy, TG and SEM were used to characterize the composition, structure and morphology of the products. All techniques show the formation of hybrid organic-inorganic (CaHAp-Acid) compound. The DRX showed that the crystallinity was significantly affected by the presence of organic acid. The structural and morphological properties of the compounds vary as a function of the organic acids content. The IR spectroscopy showed new vibration modes, seemliet related to (COO⁻) at 1416 cm⁻¹ and 1567cm⁻¹. The ¹³C NMR-MAS spectrum reveals the presence of new signals, attributed to the carbon associate to the organic acid grafted at the surface of hydroxyapatite. The TG analysis of powder prepared in presence of acids shows three weight losses, where the second loss is more significant with the increase of organic concentration in the starting solution.



The proposed mechanism for grafting of Glutamic and Aspartic acid on CaHAp surface

P6 Contribution à l'étude physico-chimique des hydroxyapatites mixtes calcium-magnésium: Réactivité de la surface apatitique greffée par l'acide glutamique

Béchir Badraoui^{1,2,*}, Sana Ben Moussa², Hassen Bachoua²

1 Institut Préparatoire aux Etudes d'Ingénieur de Monastir, Université de Monastir, 5019 Monastir, Tunisie

2 Laboratoire de Physico-chimie des Matériaux, Université de Monastir, Faculté des Sciences, 5019 Monastir, Tunisie

** e-mail : badraoui_b@yahoo.fr*

La chimie des matériaux hybrides organiques-inorganiques est une nouvelle et grande réalisation dans plusieurs domaines industriel, médical, biologique, etc ... Pour cette raison nous nous sommes intéressés à la synthèse et à la caractérisation physico-chimique et structurale des hydroxyapatites mixtes calcium-magnésium. Afin d'interpréter la réactivité de la surface apatitique, induit par l'incorporation de magnésium, nous avons préparé des nouveaux composés hybrides hydroxyapatites-acide glutamique.

Deux séries de composés apatitiques mixtes calcium magnésium ont été préparées par voie hydrothermale en absence et en présence de l'acide glutamique. Ces composés ont été caractérisés par diffraction des rayons X sur poudre, analyse chimique, spectroscopie IR, microscope électronique à balayage.

L'analyse par diffraction des rayons X montre que le composé préparé par voie hydrothermale est constitué d'une phase unique de structure apatitique jusqu'à une proportion atomique de 20,30%. L'introduction des ions magnésium, de dimension plus petites que celles des ions calcium, dans la structure apatitique est à l'origine d'une diminution des paramètres cristallins a et c. En outre l'étude de la répartition cationique entre les deux sites montre une occupation proche de la répartition statistique. La spectroscopie IR relève la présence des nouvelles bandes d'absorption attribuées au groupement organique COO-. L'intensité de ces bandes augmente avec l'augmentation du taux de magnésium ; ce qui laisse supposer un taux de greffage plus élevé en présence de magnésium.

P7 Reconstruction atomique de la surface (111) du niobium

M. Drouet^{1,*}, C. Coupeau¹, J. Durinck¹, B. Douat¹, J. Bonneville¹, J. Colin¹ et J. Grilhé¹
1 Institut Pprime, UPR3346, CNRS, Université de Poitiers, ISAE-ENSMA, SP2MI - Téléport 2 - 11
Boulevard Marie et Pierre Curie, BP 30179 F86962 FUTUROSCOPE CHASSENEUIL Cedex
* Michel.drouet@univ-poitiers.fr

RÉSUMÉ

Le niobium est un matériau d'intérêt technologique majeur, entre autre pour la réalisation des cavités supraconductrices des accélérateurs de particules. La caractérisation de ses propriétés de surface est donc primordiale en vue d'optimiser les performances de ces cavités. L'avènement de la microscopie à effet tunnel a permis des avancées significatives dans ce domaine. Mais, de façon surprenante, si les structures atomiques des surfaces cristallographiques {100} et {110} ont été abondamment étudiées tout au long des années 90, il n'existe aucune étude de ce type relative à la surface {111}.

Nous présentons ici une étude par microscopie à effet tunnel de cette surface (111) non oxydée. Cette étude met en évidence une reconstruction surmontée d'une couche partielle présentant une reconstruction R30. Suggérée sur la base d'observations par diffraction des électrons (LEED) à la fin des années 70 [1], cette reconstruction n'avait jusqu'à présent jamais été observée directement. La reconstruction R30 quant à elle n'avait jamais été mentionnée.

La stabilité de cette configuration atomique est discutée dans le cadre d'un modèle basé sur la compétition entre l'énergie de surface d'une terrasse entièrement recouverte de la configuration reconstruite et l'énergie de formation d'îlots de structure atomique dense. Les énergies des différentes configurations de surface, obtenues par des calculs ab initio, suggèrent que la configuration observée est liée à la dimension des terrasses de cette surface (111). La dimension critique obtenue est en bon accord avec la taille des terrasses obtenues dans nos conditions de préparation [2].

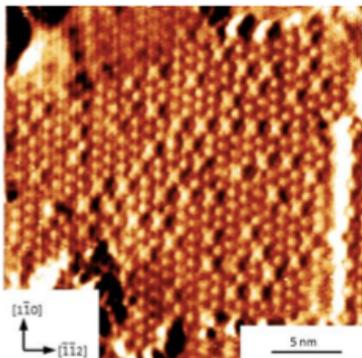


Fig. 1 : Image STM en mode signal d'erreur (.courant) de la surface (111) reconstruite du Nb

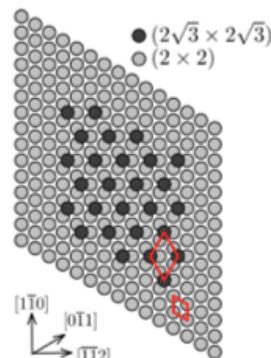


Fig. 2 : Représentation schématique des reconstructions obtenues.

REFERENCES

1. R. Pantel, M. Bujor and J. Bardol, Surf. Sci. 62 (2) (1977) 589-609
2. C. Coupeau et al., Surf. Sci. 632 (2015) 60-63

P8 Analyse de l'interface entre le silicène et le substrat d'Ag(111): étude DFT

Philippe Sonnet^{1,*}, Régis Stephan¹ and Marie-Christine Hanf¹

1 Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), CNRS UMR 7361, Université de Haute Alsace, 3b rue Alfred Werner 68093 Mulhouse cedex, France

** philippe.sonnet@uha.fr*

Depuis ces dernières années, de plus en plus de travaux sont dédiés à l'étude du silicène, système bidimensionnel formé d'atomes de silicium. Cependant, jusqu'à présent, il n'existe pas de silicène qui serait détaché de son support comme dans le cas du graphène. En particulier, sur des substrats d'argent, le silicène est obtenu avec différentes orientations. Le fait que le silicène et le substrat d'Ag soient commensurables pourrait impliquer qu'ils interagissent entre eux. En d'autres termes, l'identification des interactions entre le silicène et le substrat constituerait une étape importante pour, par la suite, pouvoir détacher cette couche de silicène du substrat sur lequel il est adsorbé.

Dans ce travail, nous avons étudié l'interface entre du silicène (3x3) et l'argent Ag (111) (4x4) au moyen de calculs effectués dans le cadre de la fonctionnelle de la densité [1]. Il semble que les atomes de Si ne soient pas liés aux atomes d'Ag par des liaisons covalentes. Cependant, la densité électronique des atomes de Si situés à proximité du substrat et celle des atomes d'Ag les plus proches ont tendance à se chevaucher, ce qui signifie que le silicène est faiblement chimisorbé. En outre, il y a une accumulation de charge négative à l'interface entre la couche de silicène et la surface d'Ag. Enfin, les calculs montrent qu'il existe un transfert d'électrons à partir du silicium vers le substrat d'Ag. Plus précisément, chaque atome de silicium situé en position haute dans la couche de silicène porte une charge positive, alors qu'il y a une charge négative sur chaque atome d'Ag situé en surface. Ces charges induisent des interactions électrostatiques attractives entre les atomes de silicium en position haute et les atomes d'Ag situés juste en dessous, conduisant à une déformation ou « buckling » du plan de surface de l'Ag. Ainsi, le silicène et le graphène sont nettement différents dans leur structure, ainsi que dans leurs propriétés électroniques. Alors que pour le graphène, les atomes de carbone se trouvent dans le même plan et sont purement hybridés sp², la couche de silicène est bouclée et les atomes de silicium sont hybridés sp²-sp³, induisant des interactions électrostatiques et une faible chimisorption avec le substrat d'Ag.

Finalement, nos résultats montrent que détacher une couche de silicène pur d'un substrat d'Ag constituera plutôt une tâche difficile, voire impossible.

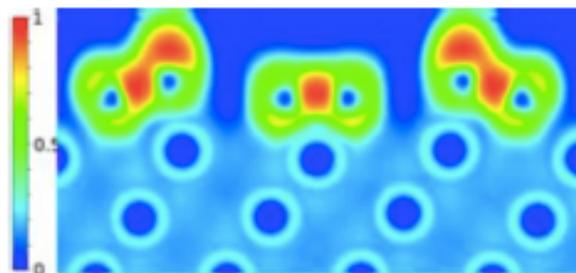


Fig. 1: Vue latérale de la fonction de localisation électronique (ELF) entre la couche de silicène et le substrat Ag(111).

REFERENCE

1. R. Stephan, M.-C. Hanf and Ph. Sonnet, Journal of Physics: Condensed Matter 27 (2015) 015002 (freely available on IOPselect)

P9 Molecular chemisorption on boron doped silicon surfaces: DFT study

Philippe Sonnet^{1,*}, Khaoula Boukari¹ and Eric Duverger²

1 Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), CNRS UMR 7361, Université de Haute Alsace, 3b rue Alfred Werner 68093 Mulhouse cedex, France

2 Institut FEMTO-ST, Université de Franche-Comté, CNRS, ENSMM, 32 avenue de l'Observatoire, 25044 Besançon cedex, France.

** philippe.sonnet@uha.fr*

ABSTRACT

By means of density functional theory calculations, we have investigated the adsorption of a single trans 4-pyridylazobenzene molecule (denoted by PAB) on doped boron Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ R30° surface (denoted by SiB) with or without boron-defect [1]. The dispersion corrections have taken into account within the approach proposed by Grimme. Two adsorption configurations are electronically studied. In the first one, the molecule is parallel to the surface and interacts with the SiB surface via the -N=N- bond. In presence of a boron-defect, a Si-N chemical bond between the molecule and the surface is then formed, while electrostatic or/and van der Waals interactions are observed in the defectless surface.

In the second adsorption configuration, the molecule presents different orientations with respect to the surface and interacts via the nitrogen atom of the pyridyl part of the PAB molecule. If the molecule is perpendicular to the perfect SiB surface, the lone-pair electrons associated with the heterocyclic nitrogen atom fill the empty dangling bond of a silicon adatom via a dative bond.

Finally, in presence of one boron-defect, the possibility of a “forced” dative bond, corresponding to a chemical bond formation between the PAB molecule and the silicon electron occupied dangling bond, is emphasized.

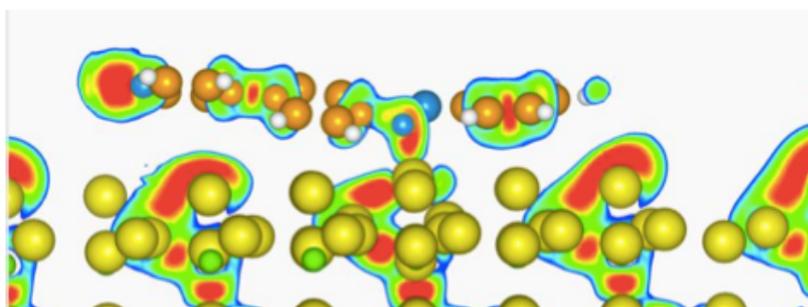


Fig. 1: Side view of the electron localisation function (ELF) for a parallel PAB adsorption model on a boron silicon surface.

REFERENCE

1. K. Boukari, E. Duverger and Ph. Sonnet, Phys. Chem. Chem. Phys. 16 (2014) 24866.

P10 DFT-D study of the cycloaddition reaction on boron doped silicon surfaces

Ph. Sonnet^{1,*}, K. Boukari¹, E. Duverger² and L. Stauffer¹

¹ Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), CNRS UMR 7361, Université de Haute Alsace, 3b rue Alfred Werner 68093 Mulhouse cedex, France

² Institut FEMTO-ST, Université de Franche-Comté, CNRS, ENSMM, 32 avenue de l'Observatoire, 25044 Besançon cedex, France.

* philippe.sonnet@uha.fr

ABSTRACT

In this work, we have investigated the molecule adsorption on $\text{Si}(111)\sqrt{3}\times\sqrt{3}R30^\circ\text{-B}$ (denoted by SiB) surfaces within the Density Functional Theory (DFT- D) method [1]. The SiB substrate is considered in three cases: defectless SiB surface (denoted SiB-0D) and SiB surfaces presenting one or two boron defects (denoted SiB-1D and SiB-2D respectively).

The SiB-0D surface is passivated by a charge transfer from the Si adatoms to the boron atoms and therefore no chemical bond between the molecule and the substrate is observed.

In the SiB-2D case, a similar molecular adsorption as already evidenced in the HPC-SiC(0001) 3×3 system is involved [2,3].

In the case of the SiB-1D surface, two Si-N bonds (denoted Si1-N1 and Si2-N2) are observed. One of them, Si1-N1, is nearly similar to that found in the HPC-SiB-2D system, but the Si2-N2 bond is unexpected. The Bader charge analysis suggests that, in the presence of the Hc molecule, the boron atoms behave like an electron reservoir whose availability varies following the involved molecular adsorption process. In the SiB-1D case, charges are transferred from the substrate to the molecule, allowing the Si2-N2 bond formation. Such a kind of molecular adsorption, not yet observed, could be designed by "assisted pseudo-cycloaddition".

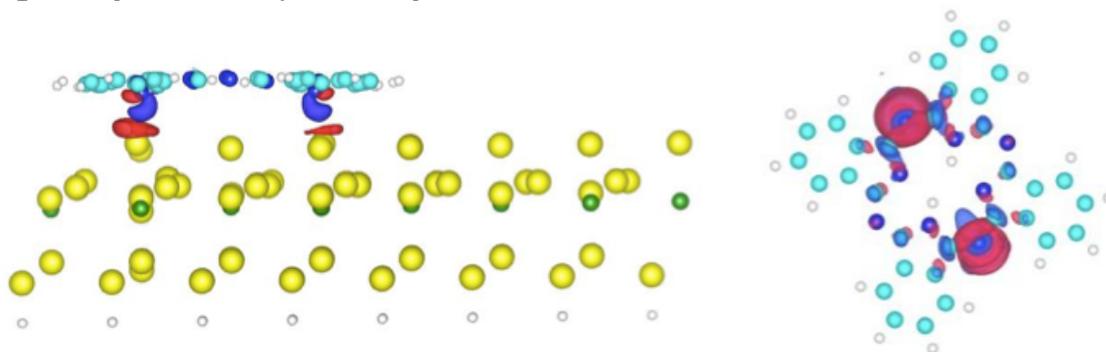


Fig. 1 : Side and top views of the charge density difference of the H adsorption on the SiB-1D surface. In order to facilitate the interpretation, the atoms of the substrate are removed in the top view. Blue and red plots correspond to positive and negative electronic charge variations respectively. Yellow, green, light blue, dark blue and white circles correspond to silicon, boron, carbon, nitrogen and hydrogen atoms respectively.

REFERENCES

1. K. Boukari, E. Duverger, L. Stauffer, Ph. Sonnet, Phys. Chem. Chem. Phys.16, 12164 (2014).
2. G. Baffou, A. Mayne, G. Comtet, G. Dujardin, Ph. Sonnet and L. Stauffer, Appl. Phys. Lett. 91, 073101 (2007).
3. G. Baffou, A. Mayne, G. Comtet, G. Dujardin, L. Stauffer

P11 Modélisations DDA et mesures LSPR de l'oxydation de nanoparticules de cuivre

Jérémy Cure^{1,2,*}, Arnaud Glaria², Yannick Coppel², Adnen Mlayah³, Bruno Chaudret⁴,
Pierre Fau²

1) ST Microelectronics, 10, rue Thales de Milet, 37071 Tours, France

2) Laboratoire de Chimie de Coordination, CNRS-Université de Toulouse, 205 route de Narbonne, 31077 Toulouse, France

3) Centre d'Elaboration des Matériaux et d'Etude des Structures, CNRS-Université de Toulouse, 29 rue Jeanne Marvig, 31055 Toulouse, France

4) Laboratoire de Physique et de Chimie des Nanomatériaux, INSA-CNRS-Université de Toulouse, 135 avenue de Rangueil, 31077 Toulouse, France.

* jeremy.cure@lcc-toulouse.fr

RÉSUMÉ

Au cours des dix dernières années, un nombre croissant d'études a révélé les remarquables propriétés des nanoparticules (NP) de cuivre dans des domaines d'applications variés tels que la catalyse, la plasmonique, la microélectronique, ainsi qu'en biologie pour leur rôle bactéricide et fongicide. Le cuivre possède, comme l'or et l'argent, une résonance plasmonique de surface localisée (LSPR) dans la gamme de longueur d'onde visible [1]. Nous présentons ici la synthèse de nanoparticules de cuivre polycristallines (taille moyenne 7 nm) obtenues dans des conditions douces [2], par hydrogénéolyse d'un précurseur métal-organique en présence d'alkylamine jouant le rôle de ligands. Ces nanocristaux ont été caractérisés en Microscopie Electronique à Transmission Haute Résolution (METHR), en spectroscopie par Résonance Magnétique Nucléaire liquide (RMN), et en spectroscopie UV-Visible pendant leur processus d'oxydation sous air [3]. En confrontant les résultats expérimentaux obtenus en absorption optique (LSPR) et les simulations basées sur le modèle DDA (Discrete Dipole Approximation), nous avons pu mettre en évidence les étapes de formation d'une monocouche incomplète d'oxyde de cuivre CuO à la surface des NP. La cinétique d'oxydation des NP est modulée par le ratio de surfactants alkylamine introduits dans le milieu (0,1 ; 0,5 ; 1 et 2 eq.), lesquels entrent dans un mécanisme d'adsorption compétitive avec l'oxydation très ralentie de ce système et l'étalonnage de l'absorption plasmonique correspondant à la monocouche d'oxyde cuivre, a permis la quantification fine de la nucléation et de la coalescence d'une couche d'oxyde sur les NP de cuivre.

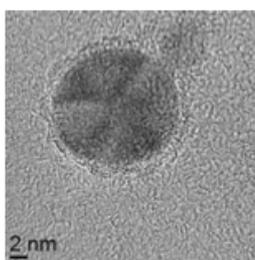


Fig. 1 : Nanoparticule de Cu@Cu₂O.

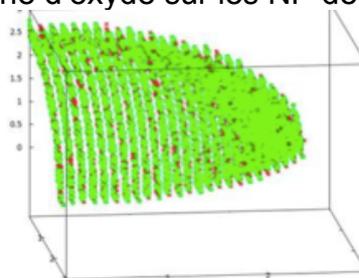


Fig. 2 : Simulation DDA de la croissance de Cu₂O / Cu

REFERENCES

- 1 G. H. Chan, J. Zhao, E. M. Hicks, G. C. Schatz, and R. P. Van Duyne. Nano Letters., 7, No. 7, 1947, (2007)
- 2 C. Barrière, K. Piettre, V. Latour, O. Margeat, C.O. Turrin, B. Chaudret and P. Fau. J. Mater. Chem., 22, 2279, (2012)
- 3 A. Glaria, J. Cure, K. Piettre, Y. Coppel, C.-O. Turrin, B. Chaudret, P. Fau. Chem. Eur. J., DOI: 10.1002/chem.201403835 (2014)

P12 Enrobage de Particules de Fer pour l'Hyperthermie en Milieu Biologique.

Arnaud Glaria¹, Wilfried Sojo Ojo¹, Sébastien Lachaize^{1,*}, Fabien Delpech^{1,*}, Bruno Chaudret¹, Céline Nayral^{1,*}, Nicolas Hallali¹, Reasmey Tan¹ et Julian Carrey¹

1 Laboratoire de Physique et Chimie des Nano-Objets (LPCNO) - UMR INSA/UPS/CNRS 5215 35 avenue de Rangueil, 31077 Toulouse CEDEX 04, France

** cnayral@insa-toulouse.fr, fdelpesch@insa-toulouse.fr, slachaiz@insa-toulouse.fr*

ABSTRACT

De nombreuses avancées dans la conception de nanoparticules (NPs) pour des applications en théranostique ont été publiées ces dernières années.¹ Parmi toutes les techniques disponibles, l'hyperthermie magnétique apparaît comme l'une des plus efficaces. En effet, de nombreux travaux ont montré que les particules d'oxydes de fer peuvent localement accroître la température et tuer les cellules tumorales.² Le fer à l'état pur, i.e. non oxydé, présente, pour sa part, une aimantation plus élevée que ses oxydes. Son utilisation à l'état de NPs permet, en effet, d'obtenir des valeurs de puissance dissipée (Specific Absorption Rate, SAR) deux fois plus élevées, Figure 1a.^{3a} Cependant, l'utilisation de ces NPs pour l'hyperthermie nécessite le passage dans l'eau, où l'une des difficultés est d'éviter leur oxydation et donc la dégradation des propriétés magnétiques. Pour pallier ce problème, nous avons développé un protocole efficace d'enrobage de particules métalliques par une couche de silice en milieu non alcoolique.^{3b-c} Nous décrivons ici en détail cette approche développée pour les particules de fer, Figure 1b, et nous montrerons que quelle que soit l'épaisseur de l'enrobage, le cœur de fer métallique est conservé. De plus, il sera possible de moduler le nombre de particules encapsulées et d'étudier indépendamment le couplage magnétique entre les cœurs métalliques. Finalement, nous montrerons comment le contrôle de la fonctionnalisation de surface ainsi que de l'agrégation de particules sont importants pour de futurs tests d'hyperthermie *in vitro*.

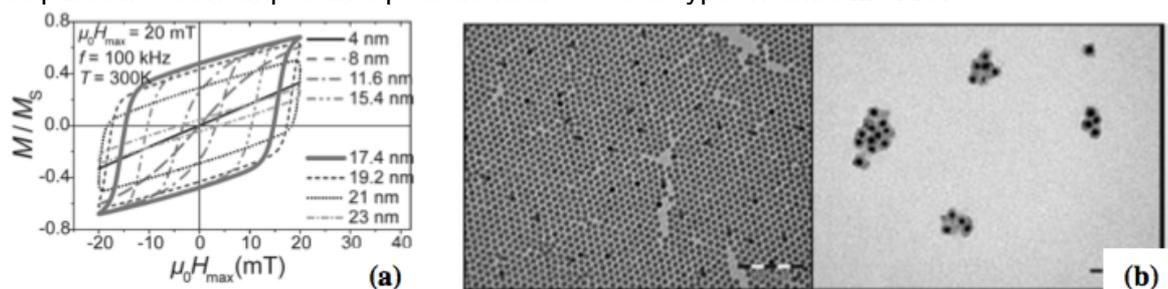


Figure 1: (a) courbes d'hystérèse calculées pour différents diamètres de NPs de fer et (b) clichés MET de NPs de Fe(0) avant et après enrobage.

REFERENCES

- (a) A. Louie, Chem. Rev. 110, 3146 (2010); (b) E.-K. Lim, T. Kim, S. Paik, S. Haam, Y.-M. Huh, K. Lee, Chem. Rev. DOI: 10.1021/cr300213b.
- (a) L. H. Reddy, J. L. Arias, J. Nicolas, P. Couvreur, Chem. Rev. 112, 5818 (2012); (b) D. Yoo, J.-H. Lee, T.-H. Shin, J. Cheon, Acc. Chem. Res. 44, 863 (2011).
- (a) B. Mehdaoui, A. Meffre, J. Carrey, S. Lachaize, L.-M. Lacroix, M. Gougeon, B. Chaudret, M. Respaud, Adv. Funct. Mater. 21, 4573 (2011); (b) N. El-Hawi, C. Nayral, F. Delpech, Y. Coppel, A. Cornejo, A. Castel, B. Chaudret, Langmuir 25, 7540 (2009); (c) F. Delpech, C. Nayral, N. El-Hawi, patent WO 2009071794.

P13 Optical determination of the plasmonic responses and shape distribution of colloidal metallic nanoparticles

A.RESANO-GARCIA, Y.BATTIE, S.AKIL, N.CHAOUI, A.EN NACIRI*

LCP-A2MC, Institut Jean Barriol

Université de Lorraine, 1 Bd Arago, 57070 Metz, France

email of corresponding author: aotmane.en-naciri@univ-lorraine.fr

ABSTRACT

Noble metal nanoparticle (NP) exhibits a very intense color which is absent in the bulk material. This property is attributed to the surface plasmon resonance (SPR) induced by the collective oscillation of their free conduction electrons. The characteristic of the SPR band depends on the NP size, shape and environment¹⁻³. This tunability makes noble metallic NP, an ideal candidate for a wide range of applications such as chemical sensor⁴, white light processing⁵ and solar cells⁶.

The optical properties of gold and silver nanoparticles (NPs) dispersed in water and distributed in shape are investigated by introducing a shape distributed effective medium theory (SDEMT). This model takes into account the variation of depolarization factor induces by a NP shape distribution. Simulations show that the shape distribution induces an inhomogeneous broadening and a decrease of the amplitude of the plasmon band. The number of plasmon bands and their positions depends on both the mean value of depolarization factor and the NP material. By solving the inverse problem with the SDEMT, we unambiguously demonstrate that the depolarization factor distribution, i.e. the shape distribution of nanoparticles can be deduced from absorption spectra.

REFERENCES

- [1] U. Kreibig, and M. Vollmer, *Optical properties of metal clusters* (Springer, Berlin, 1995).
- [2] C. Noguez, *J. Phys. Chem. C*, 111, 3806 (2007).
- [3] Y.Battie, A. Resano-Garcia, N.Chaoui, Y.Zhang, A. En Naciri, *J. Chem. Phys.* 140, (2014)
- [4] A. D. McFarland, and R. P. Van Duyne, *Nano Lett.*, 3, 1057 (2003).
- [5] R. Kitsomboonloha, C. Ngambenjawong, W. S. Mohammed, M. B. Chaudhari, G. L. Hornyak, and J. Dutta, *Micro & Nano Lett.*, 6, 342 (2011).
- [6] K. R. Catchpole, and A. Polman, *Plasmonic solar cells. Opt. Express*, 16, 21793 (2008).

P14 SrTiO₃/GaAs epitaxial templates: role of Ti at the interface, and application to the fabrication of novel opto-mechanical devices

B.Meunier^{1*}, R. Bachelet¹, G. Grenet¹, C. Botella¹, P. Regreny¹, L. Largeau², J. Penuelas¹ and G. Saint-Girons¹

¹ Université de Lyon, Ecole Centrale de Lyon, INL-UMR5270-CNRS, 69134 Ecully, France

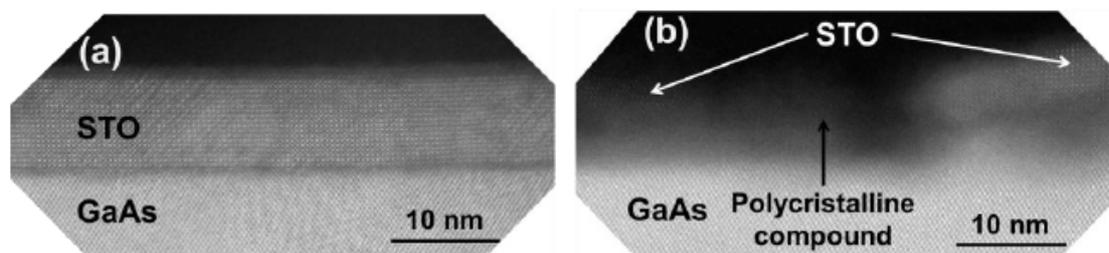
² LPN-UPR20-CNRS, 91460 Marcoussis, France

* benjamin.meunier@ec-lyon.fr

ABSTRACT

Functional oxides with perovskite structures present a variety of physical properties (ferroelectricity, piezoelectricity,) that make them very attractive for various applications. In particular, combining ferroelectric/piezoelectric oxides to GaAs-based heterostructures would open the way for the development of novel optoelectronic devices such as optical memories or agile/tunable optical sources. The possibility of growing thin SrTiO₃ (STO) layers on GaAs by molecular beam epitaxy open the way for the integration of functional oxides on this substrate.

In the present contribution we will address the physico-chemistry of the STO/GaAs interface, and show in particular that a Ti-based interface engineering strategy[1] combined with convenient growth conditions allows for obtaining STO thin layers with excellent structural properties[2]. Reflection high energy electron diffraction, transmission electron microscopy and x-ray photoelectron spectroscopy are used to assess the structural and chemical properties of the layers and interfaces. It will be shown that without any GaAs surface preparation, an unwanted polycrystalline TiGa compound is formed near the interface that significantly degrades STO structural properties[3]. A Ti interlayer efficiently prevents the formation of this unwanted compound by limiting As desorption from the GaAs substrate during STO growth thus significantly improving the structural quality of the oxide layer. We will also discuss the potential of heterostructures including a ferroelectric Pb(Zr,Ti)O₃ layer grown on a STO-templated GaAs/InGaAs quantum well for opto-mechanical applications.



STEM cross-sectional of a sample of STO/GaAs recorded in HAADF mode. (a) STO growth after a Ti-treatment of the GaAs substrate and (b) STO growth starting from bare GaAs surface.

REFERENCES

1. L. Louahadj, D. Le Bourdais, L. Largeau, G. Agnus, L. Mazet, R. Bachelet, P. Regreny, D. Albertini, V. Pillard, C. Dubourdieu, B. Gautier, P. Lecoeur, G. Saint-Girons, *Appl. Phys. Lett.* 103, 212901 (2013)
2. Y. Liang, J. Kulik, T. C. Eschrich, R. Droopad, Z. Yu and P. Maniar, *Appl. Phys. Lett.* 85 1217 (2004).
3. B. Meunier, R. Bachelet, G. Grenet, C. Botella, P. Regreny, L. Largeau, J. Penuelas, G. Saint-Girons, *Appl. Phys. Lett.* submitted

P15 Nanoparticules à transition de spin : effets de surface et modélisation

Mirko Mikolasek^{1,2}, Haonan Peng¹, Gautier Félix^{1,2}, Gábor Molnár¹, Lionel Salmon¹, William Nicolazzi^{1,*} et Azzedine Bousseksou¹

1 Laboratoire de Chimie de Coordination, CNRS & Université de Toulouse (INPT, UPS), Toulouse, France.

2 Institut Charles Gerhardt, Université 7 Montpellier 2, place Eugène Bataillon, Montpellier, France

** William.nicolazzi@lcc-toulouse.fr*

ABSTRACT

Depuis quelques années, l'élaboration, la caractérisation et l'étude fondamentale de nanoobjets à transition de spin a soulevé de nouvelles questions fondamentales sur les effets de taille, de surface et d'interface dans les transitions de phase gouvernées par des couplages de type électron-phonon aux échelles nanométriques[1].

En effet, la stabilité des phases ainsi que les transformations cinétiques sont hautement dépendantes de la taille de l'objet. Dans le cas du phénomène de la conversion de spin, les effets de taille conduisent la plupart du temps à la perte de la bistabilité (disparition de la chaleur latente et du phénomène hystérétique) ainsi que des propriétés critiques de la transition de spin (changement des températures d'équilibre de phase, transition incomplète...)[2]. La plupart de ces observations expérimentales peuvent être expliquées en considérant des énergies de surfaces différentes (principalement d'origine élastique) selon l'état de spin[3].

De plus, il a été montré que le paramètre le plus pertinent pour décrire le comportement des nanomatériaux à transition de spin n'est pas la taille, mais le rapport surface-sur-volume. Par exemple, les nanoparticules creuses conservent indépendamment de leur taille, les mêmes propriétés de conversion de spin, à la condition qu'elles conservent le même rapport surfacevolume[4].

Au delà de l'effet des énergies de surface, les propriétés intrinsèques de tout le matériau peuvent changer à l'échelle nanométrique, ce qui est principalement dû à un couplage entre les propriétés physico-chimiques interfaciales et volumiques[5]. En particulier, un durcissement (ramollissement) global ou en surface des liaisons intermoléculaires, provenant de relaxation, reconstruction de surface ou de contraintes élastiques exercées par l'environnement extérieur, conduisent à une augmentation (diminution) du module d'élasticité[4]. L'une des conséquences majeures de ce changement des propriétés élastiques avec la taille est la possibilité d'observer une ouverture (disparition) du cycle d'hystérésis dans les courbes de transition de spin, en bon accord avec des résultats expérimentaux sur des nanoparticules à conversion de spin dont la taille est inférieure à 5nm[6].

REFERENCES

1. A. Bousseksou et al, Chem. Soc. Rev. 40, 3313 (2011), H. J. Shepherd Eur. J. Inorg. Chem. 653 (2013),
2. M. Mikolasek et al, New. J. Chem. 38, 1834 (2014)
3. G. Félix et al. Phys. Rev. Lett. 110, 135 (2013)
4. G. Félix et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 16, 7358 (2014)
5. M. Mikolasek et al, Phys. Rev. B. 90, 075402 (2014)
- 6 H. Peng et al, Angew. Chem. Int. Ed.53, 10894 (2014)

P16 Analyse des interfaces dans des antimoniures d'éléments III : nano-caractérisation et modélisation

M. Vallet^{1,*}, Y. Claveau¹, C. Gatel¹, B. Warot¹, H. Tang¹, R Teissier², A. Baranov²
et A. Ponchet¹

1 CEMES CNRS-UPR 8011, Université de Toulouse, 31055 Toulouse, France

2 IES, UMR 5214, Université Montpellier 2, 34095 Montpellier, France

** maxime.vallet@cemes.fr*

ABSTRACT

Les hétérostructures quantiques alternant arséniures et antimoniures d'éléments III, comme les multicouches AlSb/InAs, sont aujourd'hui les plus adaptées pour réaliser des dispositifs électroniques émettant à des longueurs d'ondes comprises entre 2 et 5 μm et pouvant être utilisés dans la détection de gaz polluants ou les télécommunications à longue distance dans l'air. Cependant, l'absence d'atomes en commun entre AlSb et InAs induit au niveau des interfaces d'importantes discontinuités structurale, électronique et chimique. Par exemple, les liaisons de type Al-As ou In-Sb qui se forment aux interfaces induisent de fortes déformations élastiques en tension ou en compression ($\pm 7\%$) en fonction des conditions de croissance.

L'objectif de ce travail est d'étudier des alliages ternaires $\text{AlAs}_x\text{Sb}_{1-x}$, utilisés pour remplacer les barrières de type AlSb dans les multicouches InAs/AlSb, afin de réduire la contrainte d'épitaxie des barrières. Les échantillons sont réalisés par EJM (Epitaxie par Jet Moléculaire) et la composition en arsénique (x) varie de 0,08 à 0,24. Cette étude a été réalisée en couplant la microscopie électronique en transmission en haute résolution avec l'analyse d'image GPA (geometrical phase analysis). Les premiers résultats montrent l'existence d'importants champs de contrainte aux interfaces et dans la couche, suggérant que des phénomènes de démixtion et de ségrégation se produisent pendant la croissance. Des analyses chimiques, notamment le STEM-HAADF et l'EELS, sont envisagées pour compléter ces résultats et permettre de mieux définir la nature des interfaces ainsi que la composition de la couche. En parallèle, des calculs basés sur la DFT (density functional theory) sont utilisés pour la description ab-initio des différentes configurations d'interfaces. La modélisation atomistique permettra de confirmer ou non la validité de l'élasticité linéaire à ces états interfaciaux.

Ce travail est financé par l'ANR NAIADÉ (ANR-11-BS10-017).

P17 Pt sur Gd₂O₃(111)/ Si(111) : une étude XPS/XPD

D. Ferrah¹, M. El Kazzi¹, G. Niu¹, C. Botella¹, J. Penuelas¹, Y. Robach¹, L. Louahadj¹, R. Bachelet¹, L. Largeau², G. Saint-Girons¹, Q. Liu¹, B. Vilquin¹, G. Grenet^{1,*}

1 Institut des Nanotechnologies de Lyon INL-UMR5270, ECL, Ecully, F-69134, France.

2 LPN UPR20, route de Nozay 91460 Marcoussis, France

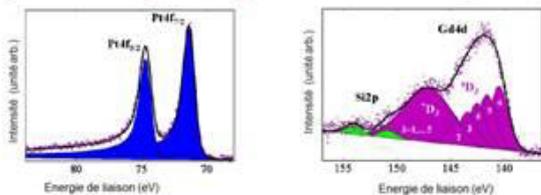
* genevieve.grenet@ec-lyon.fr

RESUME

Le contrôle des réactions à l'interface métal / oxyde est un facteur clé pour la réussite d'une surcouche métallique bidimensionnelle présentant une interface avec l'oxyde parfaitement abrupte, d'un point de vue chimique, structurel et morphologique. A cet égard, un certain taux de réactivité est nécessaire: suffisant pour permettre de mouiller correctement le métal sur l'oxyde, mais suffisamment faible pour éviter une oxydation indésirable du métal, ce qui pourrait être préjudiciable à la fiabilité du dispositif. A cet égard, le platine est particulièrement intéressant comme électrode métallique pour une structure MOS car il est censé ne pas réagir avec la couche d'oxyde sous-jacente.

Le but de ce travail était de déterminer les relations d'épitaxie et la réactivité d'interface de l'hétérostructure Pt / Gd₂O₃ / Si (111) en utilisant la microscopie à force atomique (AFM), la diffraction des rayons X (XRD), la microscopie électronique en transmission (MET), la photoémission (XPS) et la diffraction des photoélectrons (XPD). Des films minces de Pt ont été déposés par dépôt en phase vapeur (PVD) sur un template Gd₂O₃ / Si (111). Nos résultats montrent que l'oxyde Gd₂O₃ s'oriente (111) sur Si (111) avec une relation d'épitaxie de type miroir à savoir, [110] Gd₂O₃ (111) // [110] Si (111). Sur ce template Gd₂O₃ / Si (111), Pt est partiellement cristallisé avec une orientation (111) selon deux domaines. Les relations dans le plan sont du type direct : [110] Pt (111) // [110] Gd₂O₃ (111) et du type miroir: [1 1 0] Pt (111) // [110] Gd₂O₃ (111). Une légère texture de la fibre (111) est aussi présente. Les courbes azimutales XPD révèlent l'existence d'une couche α- PtO₂ (0001) hexagonale, qui sert de médiateur de mouillage pour Pt sur Gd₂O₃.

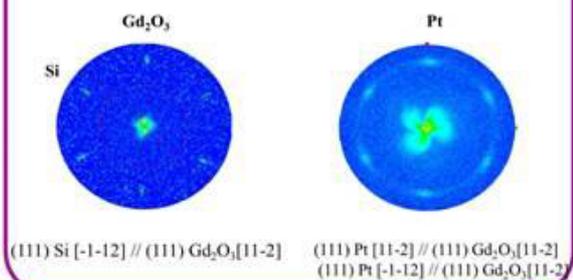
(a) Spectroscopie de photoélectrons (XPS)



- Mise en évidence du caractère métallique dans Pt4f

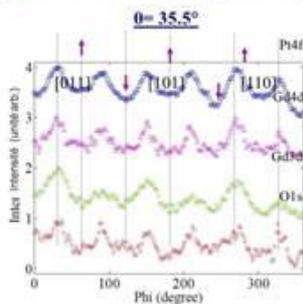
- Multiplet splitting dans Gd4d
- Présence de silicates et SiO₂

(b) Diffraction des rayons X (XRD)



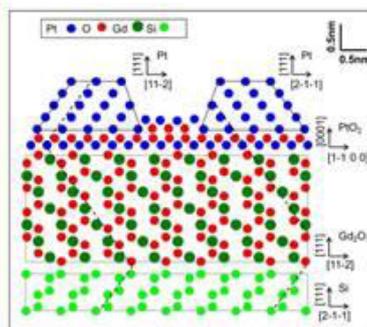
(111) Si [-1-12] // (111) Gd₂O₃ [11-2] (111) Pt [11-2] // (111) Gd₂O₃ [11-2]
 (111) Pt [-1-12] // (111) Gd₂O₃ [11-2]

(c) Diffraction des photoélectrons (XPD)



Mise en évidence d'une couche de α - PtO₂
 (0001) PtO₂ [1-100] // (111) Gd₂O₃ [11-2]

(d) Schéma de l'hétérostructure Pt/ Gd₂O₃/Si(111)



- Un domaine pour Gd₂O₃ (111)/Si(111)
 (111) Si [-1-12] // (111) Gd₂O₃ [11-2]
- Deux domaines pour Pt(111)/Gd₂O₃(111) tournés de 180° l'un de l'autre :
 (111) Pt [11-2] // (111) Gd₂O₃ [11-2]
 (111) Pt [-1-12] // (111) Gd₂O₃ [11-2]
- Une couche de mouillage de α - PtO₂ (0001) tournée de 30°
 (0001) PtO₂ [1-100] // (111) Gd₂O₃ [11-2]

P18 "Monopôles" Magnétiques Chiraux Dans Les Glaces De Spin Artificielles

Y. Perrin^{1,2,*}, N. Rougemaille^{1,2}, F. Montaigne³, B. Canals^{1,2}, M. Hehn³, H. Riahi³, D. Lacour³, J.-C. Toussaint^{1,2}, O. Fruchart^{1,2} et E. Wagner^{1,2}

1 CNRS, Inst. NEEL, F-38042 Grenoble, France

2 Univ. Grenoble Alpes, Inst. NEEL, F-38042 Grenoble, France

3 Institut Jean Lamour, Université de Lorraine and CNRS, F-54506 Vandoeuvre les Nancy, France

** yann.perrin@neel.cnrs.fr*

ABSTRACT

Grâce aux techniques de fabrication empruntées à la microélectronique, les physiciens peuvent créer artificiellement des réseaux bidimensionnels de nano-aimants. Ces objets permettent entre autres d'étudier la physique de la frustration magnétique ainsi que de tester des prédictions faites par les modèles de spin. Les configurations micromagnétiques de ces réseaux artificiels présentent l'avantage d'être observables à température ambiante, dans l'espace direct, grâce à des techniques d'imagerie magnétique comme la microscopie à force magnétique (MFM) [1]. Nous nous intéressons ici à la glace de spin kagomé (figure de gauche ci-dessous). Dans ce système, on sait préparer des configurations magnétiques locales qui s'apparentent à des paires de "monopôles" magnétiques (classiques). Sous l'action d'un champ magnétique, on sait également fractionner ces paires de "monopôles" arrivant même dans certains cas à ne laisser qu'un unique "monopôle" dans le réseau. Ces monopôles s'y déplacent par un processus d'avalanche, qui correspond à un retournement de proche en proche de l'aimantation de certains nano-aimants. Nous montrons dans cette contribution que les "monopôles" magnétiques des glaces de spin artificielles sont chiraux (simulation au centre de la figure et image MFM à droite). Nous expliquons pourquoi ce degré de liberté supplémentaire, qui n'est pas dans les modèles de spin, pourrait jouer un rôle prépondérant dans leur propagation.

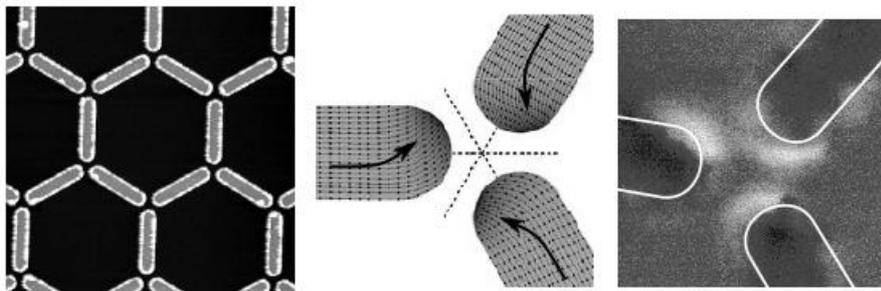


Figure: À gauche, image topographique d'un réseau kagomé de nano-aimants. Au centre, simulation micromagnétique d'un "monopôle" magnétique montrant sa structure chirale [2]. À droite, image MFM d'un "monopôle" du réseau de gauche présentant une structure micromagnétique similaire

REFERENCES

1. R. F. Wang et al., Nature 439, 303 (2006).
2. N. Rougemaille et al., New J. Phys. 15, 035026 (2013).

P19 Non-Universality Of Artificial Frustrated Spin Systems

I. A. Chioar^{1,2,*}, N. Rougemaille^{1,2}, A. Grimm^{1,2}, O. Fruchart^{1,2},
E. Wagner^{1,2}, M. Hehn³, D. Lacour³, F. Montaigne³ and B. Canals^{1,2}

1 CNRS, Inst. NEEL, F-38042 Grenoble, France

2 Univ. Grenoble Alpes, Inst. NEEL, F-38042 Grenoble, France

3 Institut Jean Lamour, Université de Lorraine and CNRS, F-54506 Vandoeuvre les Nancy, France

* ioan.chioar@neel.cnrs.fr

ABSTRACT

Artificial spin ice systems provide an exciting playground for the study of spin models. In the case of 2D lithographically-patterned arrays of nanomagnets, magnetic Imaging techniques have successfully been used to directly observe, in real space, how each individual spin locally accommodates frustration [1]. Furthermore, artificial spin systems offer the opportunity to change the geometry of the array at will and to explore new phenomena.

However, in most cases, these pseudo-spins can present high magnetic anisotropy barriers, preventing the reversal of their magnetization and thus rendering them insensitive to thermal fluctuation. Therefore, a demagnetization procedure has been generally used to make this type of systems evolve towards lower energy manifolds where exotic magnetic behavior is expected [2–5].

So far, most efforts have been focused on the square and kagome lattices of in-plane magnetized nanomagnets. However, Zhang and coworkers [6] have recently investigated the properties of an artificial frustrated spin system in which the nanomagnets have out-of-plane magnetization. In this study, a carefully comparison is performed between the development of pairwise spin correlations for two different artificial realizations of the kagome topology: the ferromagnetic kagome spin ice model (ksi), with in-plane magnetized spins, and the antiferromagnetic kagome Ising model (kI), with out-of-plane magnetized spins. One important conclusion has been drawn: the two systems described by spin models based solely on nearest-neighbor interactions show striking similarities in the development of moment pair correlations, indicating a universality in artificial spin ice behavior. The physics of demagnetized artificial spin ice systems thus seems to transcend the particular material realization, and even the geometry of the magnetic moments. Investigating the properties of similar artificial kagome arrays of nanomagnets with out-ofplane magnetization, we end up with a different conclusion [7]: our experimental findings can only be described by spin models that include long range dipolar interactions, breaking the apparent universality between the ksi and kI frustrated systems, as they develop clearly distinctive pairwise spin and charge correlations. Therefore, we can assess the limits of the reported universality and we also provide arguments to explain why these two systems show, at first sight, striking similarities in the development of pairwise spin correlations.

REFERENCES

1. R. F. Wang et al., Nature 439, 303 (2006).
2. R. F. Wang et al., J. Appl. Phys. 101, 09J104 (2007).
3. X. Ke et al., Phys. Rev. Lett. 101, 037205 (2008).
4. G. Möller and R. Moessner, Phys. Rev. B 80, 140409 (2009).
5. N. Rougemaille et al., Phys. Rev. Lett. 106, 057209 (2011).
6. S. Zhang et al., Phys. Rev. Lett. 109, 087201 (2012).
7. I.A. Chioar et al., Phys. Rev. B 90, 064411 (2014).

P20 Processes And Factors Influencing The Intercalation Between Graphene And Iridium

S. Vlaic^{1,2,*}, A. Kimouche^{1,2}, J. Coraux^{1,2}, B. Santos³, A. Locatelli³ and N. Rougemaille^{1,2}

1 CNRS, Inst. NEEL, F-38042 Grenoble, France

2 Univ. Grenoble Alpes, Inst. NEEL, F-38042 Grenoble, France

3 Elettra – Sincrotrone Trieste, I-34149 Basovizza, Trieste, Italy

* sergio.vlaic@espci.fr

ABSTRACT

Besides their potential for mass production of graphene, epitaxial graphene systems make it possible to manipulate graphene's properties and to induce new ones, in a finely controlled manner, by nanostructuring, defect engineering, strain engineering, and intercalation. The latter consists of inserting foreign species between graphene and its substrate and has attracted a great deal of attention since the last 5 years. It has allowed one, for instance, to fully decouple graphene from its substrate (H intercalation [1]), to spin-polarize graphene's electronic bands (Au intercalation [2]), and to manipulate the ferromagnetism of an intercalated Co layer [3].

Even though intercalation has been known since the 1980's, it has only been recent that pathways explaining how intercalation initiates have been pursued. To date only a few have been identified: graphene edges [4] and pre-existing point defects, on flat graphene regions [5] as well as at the intersection between graphene wrinkles (linear delamination of graphene from its substrate) [6].

Real time monitoring of the intercalation of cobalt between graphene and Ir(111) with the help of low-energy electron microscopy (LEEM), has provided us with greater insight. We discovered unanticipated intercalation pathways, unveiled the processes energetics and how both depend on the graphene-substrate interaction.

More specifically, we found that intercalation does not require the pre-existence of point defects inside the graphene lattice to proceed, but can occur at curved regions, such as those found at graphene wrinkles and on top of substrate step edges [7]. Curved region intercalation is found to be in competition with edge intercalation. We show that these two processes and their relative occurrence can be controlled by temperature and the interaction of graphene with the substrate [7-8].

REFERENCES

1. C. Riedl et al., Phys. Rev. Lett. 103, 246804 (2009).
2. A. Varykhalov et al., Phys. Rev. Lett. 101, 157601 (2008).
3. N. Rougemaille et al., Appl. Phys. Lett. 101, 142403 (2012) ; J. Coraux et al., J. Phys. Chem. Lett. 3, 2059 (2012).
4. P. Sutter, J. T. Sadowski, and E. A. Sutter, J. Am. Chem. Soc. 132, 8175 (2010).
5. M. Sicot et al., ACS Nano 6, 151 (2012).
6. M. Petrović et al., Nat. Commun. 4, 2772 (2013).
7. S. Vlaic et al., Appl. Phys. Lett. 104, 101602 (2014).
8. S. Vlaic et al., unpublished.

P21 Perpendicular Magnetic Anisotropy Of Cobalt Films In Contact With Graphene

N. Rougemaille^{1,2,*}, A. T. N'Diaye³, J. Coraux^{1,2}, C. Vo-Van^{1,2},
O. Fruchart^{1,2} and A. K. Schmid³

1 CNRS, Inst. NEEL, F-38042 Grenoble, France

2 Univ. Grenoble Alpes, Inst. NEEL, F-38042 Grenoble, France

3 NCEM, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, California 94720, USA

* nicolas.rougemaille@neel.cnrs.fr

ABSTRACT

Owing to its peculiar electronic band structure, high carrier mobility and long spin diffusion length, graphene is a promising two-dimensional material for microelectronics and spintronics. Graphene also shows interesting magnetic properties when in contact with a ferromagnetic metal (FM). For instance, graphene carries a net magnetic moment when deposited on Fe/Ni(111) [1], and a 13 meV spin splitting can be induced in graphene due to proximity with a heavy element [2].

While these works illustrate potential advantages of integrating graphene within a magnetic stack, the influence of graphene on the magnetic properties of a FM is still largely unexplored. In particular, non-magnetic overlayers generally affect the magnetic anisotropy energy (MAE) of thin layers, where interfaces play an important role. We can then Wonder how an interface with graphene would influence the MAE of a thin FM film. However, the fabrication of atomically flat graphene/FM and FM/graphene interfaces is not an easy task (graphene growth on metals is usually conducted at temperatures for which thin film dewetting can occur, and metal evaporation on graphene often yields clustered deposits).

Using spin-polarized low-energy electron microscopy (SPLEEM) and Auger électron spectroscopy, we study the intercalation of cobalt deposited on top of graphene/Ir(111) and find that a graphene top layer affects the magnetic properties of nm-thick Co films on Ir(111) [3,4]. We show that in the intercalated cobalt, perpendicular magnetic anisotropy is favored over an unusually large thickness range. Compared to the vacuum/Co interface, the MAE is significantly larger for a graphene-terminated Co surface. The hybridization of the Co and graphene electron orbitals very likely plays a key role in this unusual MAE. These results open new perspectives for graphene-based spintronic devices with perpendicular magnetic anisotropy.

REFERENCES

1. M. Weser et al., Phys. Chem. Chem. Phys. 13, 7534 (2011).
2. A. Varykhalov et al., Phys. Rev. Lett. 101, 157601 (2008).
3. N. Rougemaille et al., Appl. Phys. Lett. 101, 142403 (2012).
4. J. Coraux et al., J. Phys. Chem. Lett. 3, 2059 (2012).

P22 Molecules affect charge transport in nano-particle self-assemblies, at room temperature

Simon Tricard^{1,*} and Bruno Chaudret¹

¹ LPCNO, INSA, CNRS, Université de Toulouse, 135 avenue de Rangueil, 31077 Toulouse, France

* simon.tricard@insa-toulouse.fr

ABSTRACT

The study of nano-objects is more and more common in academics but also in industry. However, interest in this type of system has often been narrowed to the intrinsic properties of the objects. Indeed, a key lock to the study of collective properties – opening the door to new applications – is the manipulation of the nano-objects to get large-scale organized systems. Self-assembly is a chemical approach, very simple in principle, but whose implementation requires a precise and rigorous experimental knowledge. The purpose of our work is to achieve self-assembly where the driving force is a specific interaction between the ligands that stabilize the nano-objects. As a first proof of concept, we chose systems of 1.5 nm platinum nano-particles, forming micrometer rods thanks to the presence of hydrogen bonds between functionalized phenol ligands.

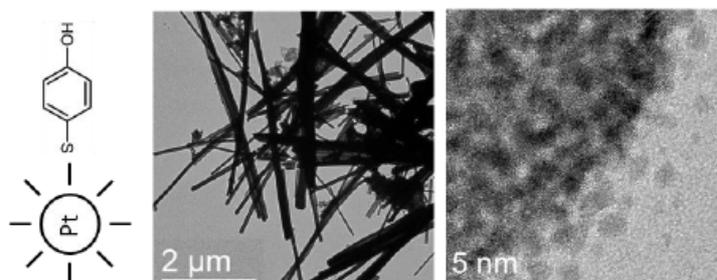


Fig. 1 : 1.5 nm Pt nano-particle self-assemblies stabilized by mercaptophenol ligands: structure scheme and TEM images at different scales.

First attempts of charge measurements on these systems showed characteristics that depended on the nature of the ligands (mercaptophenol, aminothiophenol, hydroquinone, mercaptobenzoic acid), at room temperature. These interesting first results prove that Pt nano-particle self-assemblies are promising systems to understand and control charge transport through molecules.

REFERENCES

1. D. V. Talapin, J. S. Lee, M. V. Kovalenko, E. V. Shevchenko, Chem. Rev. 2010, 110, 389-458.
2. S. Gomez, L. Erades, K. Philippot, B. Chaudret, V. Colliere, O. Balmes, J. O. Bovin, Chem. Commun. 2001, 1474-1475.

P23 Couches minces photochromiques Ag/TiO₂ synthétisées par pulvérisation magnétron sur substrats flexibles

D. K. Diop^{1,2}, L. Simonot¹, N. Destouches², F. Pailloux¹, P. Guérin¹, G. Abadias¹ et D. Babonneau^{1,*}

1 Institut P', Département Physique et Mécanique des Matériaux, UPR 3346 CNRS - Université de Poitiers, SP2MI, 11 Bvd M. & P. Curie, BP 30179, 86962 Futuroscope Chasseneuil Cedex, France
2 Laboratoire Hubert Curien, UMR 5516 CNRS, Université de Lyon et Université Saint-Etienne Jean Monnet, 18 Rue Professeur Benoît Lauras, 42000 Saint-Etienne France
** david.babonneau@univ-poitiers.fr*

ABSTRACT

Les couches minces Ag/TiO₂, constituées de nanoparticules d'argent dans une matrice nanoporeuse de TiO₂, peuvent changer de couleur sous l'effet d'une excitation lumineuse (photochromisme) [1-2]. Notre objectif est d'explorer la synthèse par pulvérisation magnétron à basse température ainsi que les propriétés photochromiques multicolores de telles couches minces déposées sur des supports flexibles, comme le plastique ou le papier, compatibles avec la plupart des applications liées aux domaines de la sécurité et de la traçabilité mais ne résistant pas à des températures élevées. Le but est en fait d'induire des changements permanents ou réversibles de couleur en se fondant sur le contrôle par laser (dans le domaine UV/visible) de la résonance de plasmons de surface des nanoparticules d'argent, dont la forme, l'amplitude et la position peuvent être modifiées selon les conditions d'illumination (longueur d'onde, intensité, énergie déposée) utilisées. Nos résultats montrent que, selon les conditions de croissance de la matrice de TiO₂, l'argent peut se présenter soit sous forme oxydée (échantillons incolores) soit sous forme de nanoparticules métalliques (échantillons colorés). De plus, il est possible de contrôler la couleur de ces couches déposées sur des substrats souples de PET par l'intermédiaire de réactions photo-induites d'oxydo-réduction (réversibles, voir Fig. 1) et/ou par croissance thermique (irréversible) induite par l'absorption plasmonique.

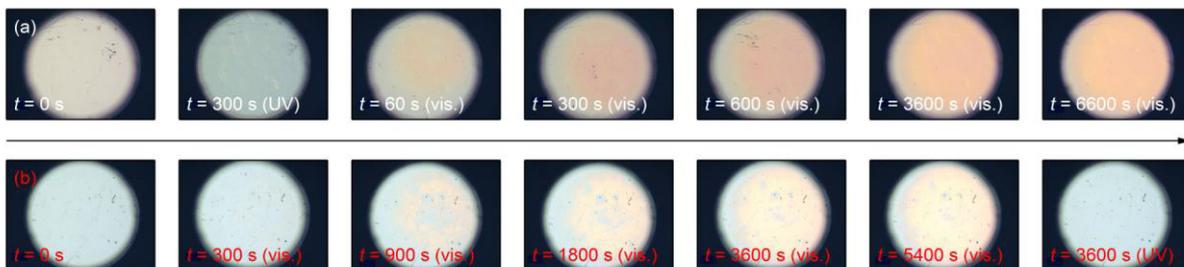


Fig. 1 : Exemples de colorations obtenues pour différentes conditions d'insolation UV (244 nm)/visible (647 nm) de couches minces Ag-TiO₂ déposées par pulvérisation magnétron sur des substrats souples de PET (images ~2,62'1,96 mm²). (a) Échantillon brut de dépôt incolore (argent oxydé) et (b) échantillon brut de dépôt coloré (argent métallique).

REFERENCES

1. Y. Ohko, T. Tatsuma, T. Fujii, K. Naoi, C. Niwa, Y. Kubota, and A. Fujishima. Nat. Mater. 2, 29-31 (2003).
2. N. Crespo-Monteiro, N. Destouches, L. Bois, F. Chassagneux, S. Reynaud, and T. Fournel. Adv. Mater. 22, 3166-3170 (2010).

This work has been carried out within the PHOTOFLEX project no. ANR-12-NANO-0006 funded by the French National Agency (ANR).

P24 Au/Alkanethiols/GaAs(001): Growth, Homogeneity And Electronic Properties At The Nanoscale

A.Junay*, S.Guézo, F.Solal, P.Turban, G.Delhayé, S.Ababou-Girard

Institut de Physique de Rennes, Département Matériaux Nanosciences, Physique des Surfaces et Interfaces, Université Rennes 1, CNRS, UMR 6251, 35042 Rennes Cedex

* alexandra.junay@univ-rennes1.fr

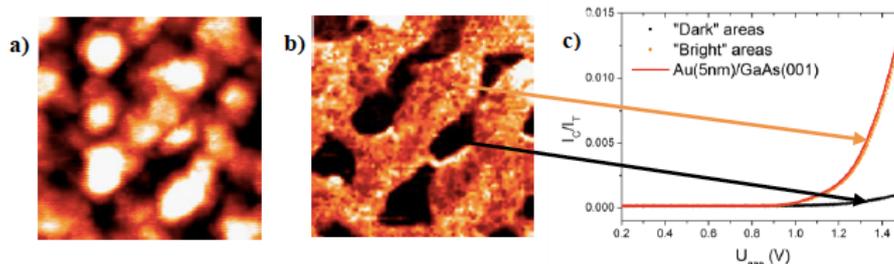
ABSTRACT

Top-contact metal electrode deposition on organic molecular monolayer (OML)/semiconductor heterostructures is still a critical issue, leading to metal penetration through the molecules and monolayer's damage [1]. Here, we report on the potentialities of BEEM [2-3] (Ballistic Electron Emission Microscopy, a STM derived technique) to quantitatively characterize the degree of metal penetration and the local transport properties at the nanometer scale.

Local measurements are performed across Au/alkanethiols/GaAs(001) heterostructures (entirely prepared *in situ* under ultrahigh-vacuum environment) with two kind of metal deposition methods : vapor deposited Au at room temperature and low temperature buffer layer assisted deposition [4] in which the sample is precovered with an overlayer of a condensed noble gas (Xe) which serves as a soft landing layer.

BEEM imaging mode provides mapping of the local hot-electron transmission. In case of vapor deposited Au, inhomogeneities at heterostructures interfaces are demonstrated. Quantitative information of these different domains can be obtained with local transport measurements in spectroscopy mode. By determining the local barrier height and the BEEM current attenuation in each area, and by comparing with the well-known Au/GaAs(001) Schottky contact [5], we can distinguish areas where the organic monolayer is short-circuited or not by the gold top-layer. In case of Xe buffer layer deposition, no short-circuited areas are observed and the BEEM current is strongly attenuated by the OML.

By spatially resolving the degree of metal penetration through the organic monolayer and by locally studying the transport properties in function of the molecular chain length, we show here that BEEM is a powerful tool for electronic properties characterization of hybrid heterostructures at nanometer-scale.



(a) STM topography, (b) BEEM image (50x50nm.) and (c) corresponding BEEM current curves from Au(5nm)/hexadecanethiols/GaAs(001) with vapor deposited Au at room temperature. (Tip bias: -1.8V, tunneling current: 5 nA) Color scale: STM 0-0.96nm, BEEM current 52pA-159pA.

REFERENCES

1. Haick, H.; Cahen, D. *Prog. Surf. Sci.* **83**, 217-261 (2008)
2. Kaiser, W. J.; Bell, L. *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1406-1409 (1988)
3. Bell, L. D.; Kaiser, W. J. *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2368-2371 (1988)
4. Maintani, M.M. ; Allara, D. et al, *Appl. Phys. Lett.*, **96**, 173109 (2010)
5. Guézo, S. ; Turban, et al, G. *Phys. Rev. B*, **81**, 085319 (2010)

P25 Etude de surfaces vicinalesde saphir par diffusion centrale des rayons X sous incidence rasante et microscopie à force atomique

Elsa Thune^{1*}, Caroline Matringe¹, René Guinebretière¹, David Babonneau²

1 Laboratoire Science des Procédés Céramiques et de Traitements de Surfaces (SPCTS - UMR CNRS 7315), Ecole Nationale Supérieure de Céramique Industrielle - Centre Européen de la Céramique, 12 rue Atlantis, 87068 Limoges Cedex, France

2 Institut Pprime (UPR 3346) Université de Poitiers, boulevard Marie et Pierre Curie - Téléport 2, BP 30179, F-86962 Futuroscope - Chasseneuil Cedex, France

** elsa.thune@unilim.fr*

ABSTRACT

Les propriétés finales de systèmes nanostructurés dépendent de la forme et de la taille des nano-objets déposés mais aussi de leur organisation sur la surface.

Dans ce contexte général, l'utilisation de surfaces vicinales est un moyen intéressant pour réaliser des substrats gabarits [1]. En effet, au cours de traitements thermiques, les marches, créées lors de la découpe du monocristal selon un plan légèrement désorienté par rapport à un plan cristallographique dense, vont se regrouper en paquets de marches conduisant ainsi à une surface organisée périodiquement dans une voire deux directions. Ces substrats gabarits sont chimiquement et thermiquement stables sur une longue période et dans divers environnements (air, sous vide, à hautes températures) et peuvent être ainsi utilisés avec différentes techniques de dépôts pour la synthèse de nanoparticules.

La nanostructuration de ces surfaces dépend à la fois de paramètres propres à l'échantillon (angles de miscut et d'azimut) et des conditions de traitement thermique (température, durée, atmosphère), nous permettant ainsi de contrôler la largeur des terrasses et la hauteur des marches. La morphologie des surfaces vicinales a, tout d'abord, été caractérisée ex-situ par microscopie à force atomique (AFM) après chaque traitement thermique. Des mesures de diffusion centrale des rayons X sous incidence rasante (GISAXS) ont été réalisées sur la ligne BM02 à l'ESRF (Grenoble) sur un montage spécifique récemment installé sur cette ligne. Nous avons orienté très précisément les bords de marches présentes sur les surfaces par rapport à la direction du faisceau incident de rayons X et réalisé de réelles mesures tridimensionnelles des distributions d'intensité diffusées. La modélisation des signaux obtenus, en utilisant le logiciel FitGISAXS [2], nous permet de déterminer la morphologie et l'organisation de la surface.

REFERENCES

1. E. Thune et al., *Applied Surface Science* 256, 924–928(2009).
2. D. Babonneau, *Journal of Applied Crystallography* 43, 929-936(2010)

P26 Interaction électronique entre le graphène dopé et des molécules de porphyrines

J. Lagoute^{1,*}, V. D. Pham¹, O. Mouhoub¹, F. Joucken², V. Repain¹,
C. Chacon¹, A. Bellec¹, Y. Girard¹, et S. Rousset¹

¹ Laboratoire Matériaux et Phénomènes Quantiques, Université Paris Diderot, 10 rue Alice Domon et Léonie Duquet, Paris, France

² Centre de recherche en Physique de la matière et du rayonnement, Université de Namur, 61 Rue de Bruxelles, 5000 Namur, Belgium

*jerome.lagoute@univ-paris-diderot.fr

ABSTRACT

Le graphène est un monofeuillet de carbone dont les propriétés chimiques et électroniques sont très prometteuses pour développer des applications dans différents domaines et explorer au niveau fondamental le comportement des électrons dans des systèmes à basses dimensions. Dans ce contexte il est intéressant d'être capable de contrôler la structure électronique du graphène pour obtenir de nouvelles fonctionnalités. Le dopage obtenu en substituant des atomes d'azote à des atomes de carbone est une voie très explorée pour atteindre cet objectif. Afin de pouvoir exploiter les propriétés du graphène dopé, dans des capteurs ou autres dispositifs, il est important de comprendre comment le graphène dopé interagit avec des molécules déposées à sa surface. Nous avons étudié l'interaction de molécules de tétraphényl-porphyrine (H₂TPP) avec du graphène dopé par microscopie à effet tunnel (STM) à basse température [1]. Les mesures montrent que le couplage électronique molécule-graphène est faible comparativement au cas de substrats métalliques. La spectroscopie tunnel locale révèle que les molécules situées à proximité d'un atome d'azote voient leurs états moléculaires déplacés vers les basses énergies. Ceci traduit un transfert de charge du graphène vers les molécules sur les sites dopants. Ces résultats apportent de nouvelles informations sur la manière dont les sites dopants du graphène modifient l'interaction électronique avec des molécules adsorbées.

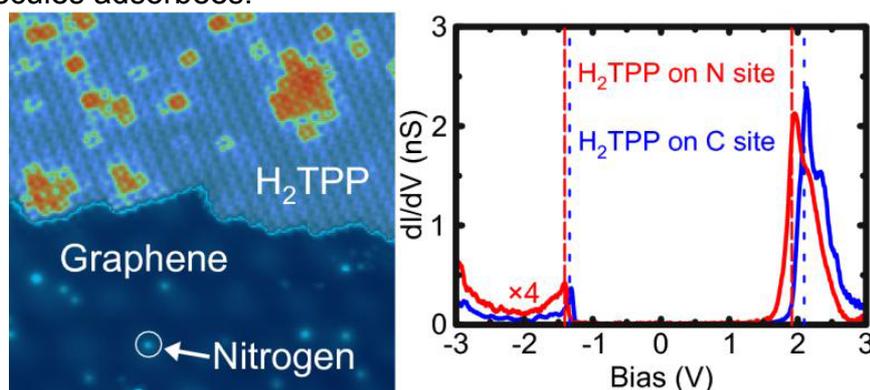


Fig. 1 : (gauche) Image STM d'une surface de graphène dopé partiellement recouverte de molécules de porphyrines (H₂TPP). (droite) Spectres des molécules adsorbées sur des sites carbone (bleu) ou azote (rouge) indiquant un décalage vers les basses énergies des pics d'états moléculaires pour les molécules en interaction avec l'azote.

REFERENCES

1. V. D. Pham, J. Lagoute, O. Mouhoub, F. Joucken, V. Repain, C. Chacon, A. Bellec, Y. Girard, and S. Rousset, ACS Nano 8, 9403 (2014)

P27 Observation De Macromolécules De Type Substances Humiques Par AFM

Céline Martias*¹, Agnès Smith¹, Elsa Thune¹, Nicolas Villandier², Vincent Gloaguen²

1Sciences des Procédés Céramiques et de Traitements de Surface (SPCTS), Ecole Nationale Supérieure de Céramique Industrielle, Centre Européen de la Céramique, 12 rue Atlantis, 87068 Limoges cedex (France)

2Laboratoire de Chimie des Substances Naturelles (LCSN), Université de Limoges, 123 avenue Albert Thomas, 87065 Limoges cedex (France)

* *celine.martias@unilim.fr*

RÉSUMÉ

La microscopie par force atomique a été utilisée afin d'observer la structure i.e la forme, la taille et la conformation de macromolécules de type substances humiques (SH) adsorbées sur des surfaces de mica clivées. Les SH sont des macromolécules constituées d'un noyau aromatique plus ou moins important entouré de chaînes aliphatiques riches en groupements fonctionnels de type carboxyles ou hydroxyles. Cependant, il est difficile de donner une description des SH car elles se comportent comme des organismes vivants dont la structure évolue dans le temps selon les conditions environnantes. Nos travaux antérieurs¹ (figure 1) ont montré que la conformation des SH semble jouer un rôle dans leur processus d'adsorption sur des surfaces minérales. L'étude présentée a donc pour objectif d'observer les SH à différentes concentration et dans diverses conditions de pH ou de force ionique afin de compléter les travaux entamés. Dans un premier temps, les conditions de préparation des échantillons, à savoir le temps d'immersion de la plaquette de mica dans la solution de SH ou la nécessité ou non d'une étape de rinçage, ont été optimisées. Puis dans un second temps, un acide fulvique commercial (AF) a été observé à différentes concentrations 250, 100 et 10 mg.L⁻¹ puis à pH 3 et 13 et à des forces ioniques différentes fixées par une concentration en Chlorure de Sodium (NaCl) de 5 ou 10 mmol.L⁻¹.

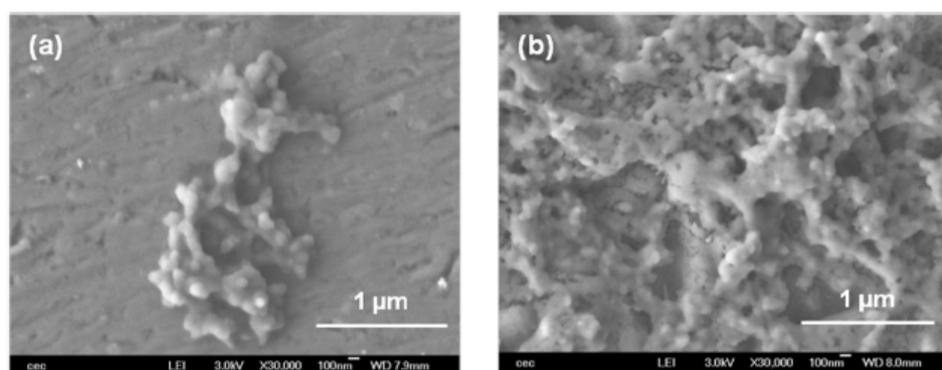


Fig. 1 : Photos MEB de AF en milieu acide (a) et en milieu alcalin (b) 1

RÉFÉRENCES

1. Goure-Doubi, H. *et al.* Interfacial reactions between humic-like substances and lateritic clay: Application to the preparation of “geomimetic” materials. *J. Colloid Interface Sci.* **434**, 208–217 (2014).

P28 Structural Transitions in Supported Co-Ag Nanoalloys revealed by Element-selective Investigations

A. Lemoine^{1, 2}, A. Coati², Y. Garreau^{2,3}, C. Andreazza-Vignolle¹, J. Creuze⁴, B. Legrand⁵, P. Andreazza^{1*}

¹ Centre de Recherche sur la Matière Divisée, Univ. Orléans, CNRS, 45071 Orléans

² Synchrotron Soleil, L'Orme de Merisiers, Saint Aubin, 91192 Gif-sur-Yvette

³ Laboratoire Matériaux et Phénomènes Quantiques, Univ. Paris Diderot-Paris 7, CNRS, 75205 Paris

⁴ SP2M, ICMMO, Univ. Paris-Sud, 91405 Orsay Cedex

⁵ SRMP/DMN, SRMP-DMN, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex

* pascal.andreazza@univ-orleans.fr

ABSTRACT

As atomic structure and morphology of particles are directly correlated to their functional properties, experimental methods probing local and average features of multi-metallic nano-objects (Nanoalloys) at the nanoscale elicit a growing interest. Grazing incidence small-angle x-ray scattering (GISAXS) allows the investigation, on a limited probed depth, of the size, shape and spatial distribution of supported nanostructures while wide-angle x-ray scattering (GIWAXS) provide information about structural transitions with size, temperature or substrate effects [1]. To disentangle complex chemical effect (core-shell transition, partial alloying, phase separation, atom mobility...) in supported multi-component nano-structures [2-4], the anomalous variation of the scattering factor close to an x-ray absorption edge enables element specific investigations. The combination of grazing incidence with the anomalous technique provides a powerful dual method, the anomalous grazing incidence small- and wide-angle X-ray scattering (AGISAXS and AGIWAXS), to extract nanoscale effect with a chemical resolution [4-5]. Nevertheless, a proper data analysis allowing an atom pair scattering function extraction requires accurate quantitative measurements, recently performed in SIXS beamline at the Soleil synchrotron [6], associated to pattern calculations from TBIM Monte Carlo simulations of nanoalloy models.

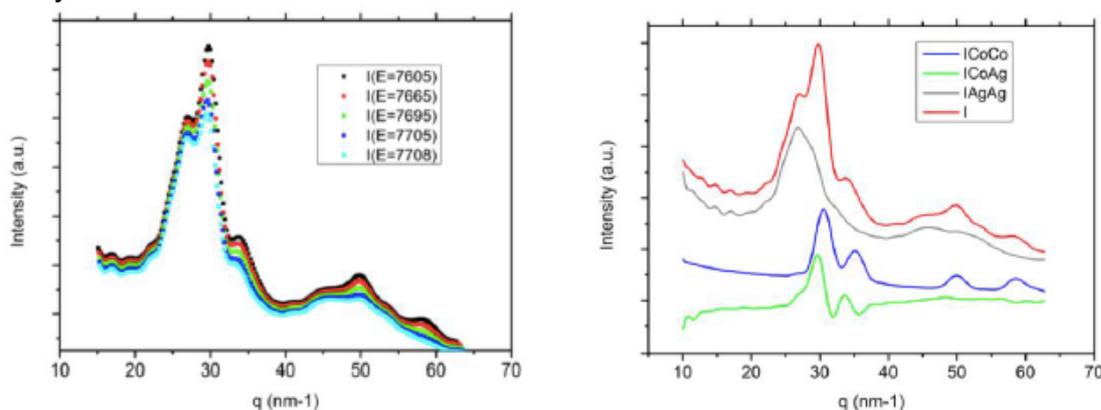


Fig: Simulated GIWAXS patterns and corresponding pair scattering intensity of 3-nm sized core-shell CoAg

REFERENCES

- 1 P. Andreazza in « *Nanoalloys: Synthesis, Structure and Properties* », Eds D.Alloyeau et al., p69-114 (2012) Springer-Verlag, London
- 2 P. Andreazza, H. Khelfane, O. Lyon, C. Andreazza-Vignolle, A. Ramos, and M. Samah, *Eur. Phys. J.*, **218**, 231-244 (2012)

P29 Le Champ Électrique à l'Interface MgO/eau

Sara Laporte^{1*} et Marco Saitta¹

¹ Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de Cosmochimie (IMPMC)

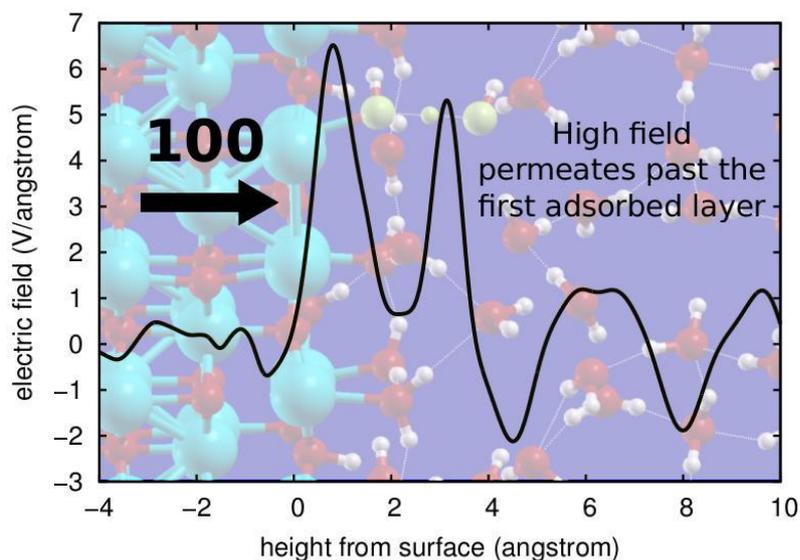
Université Pierre et Marie Curie, 4 Place Jussieu, 75005 Paris

* sara.laporte@impmc.upmc.fr

RÉSUMÉ

Nous avons effectué des calculs DFT d'une interface modèle MgO(001)/eau, en se concentrant sur un aspect jusqu'ici peu exploré [1,2] : le champ électrique intrinsèque à la surface. Il s'avère que même une surface idéale et non-chargée dans le vide, telle que MgO(001), présente un champ électrique à courte portée, mais intense, atteignant la dizaine de V/Å. Nous avons construit l'interface avec l'eau tout d'abord en rajoutant une monocouche d'eau, se basant sur une configuration observée expérimentalement à 300K et confirmée par des calculs [3]. Le profil de champ électrique calculé pour cette configuration montre un écrantage dû à la présence de l'eau, avec un champ maximal de 6V/Å à proximité de la monocouche adsorbée. Nous avons rajouté plusieurs couches d'eau par dessus la première couche et avons laissé le système évoluer selon une dynamique moléculaire Ab-initio (AIMD) à 300K. Les résultats ont montré que l'eau se dissocie spontanément non-seulement dans la première couche, mais qu'il y a aussi des échanges de protons assez fréquents entre la première et deuxième couche. Au delà de la deuxième couche, certaines propriétés de l'eau liquide non-confinée semblent être retrouvées, telles que la fonction de corrélation des distance O-O, et la distribution isotropique des dipôles des molécules d'eau. L'étude montre que l'eau interfaciale est fortement affectée par la présence de la surface, et que ceci peut être relié à la portée du champ électrique intrinsèque

Electric field



RÉFÉRENCES

1. Lukas Vlcek et al., *Langmuir* 23, 4925-4937 (2007)
2. Annalisa D'Ercole et al., *The Journal of Chemical Physics* 115, 509-518 (2001)
3. Radoslaw Wlodarczyk et al., *The Journal of Physical Chemistry C* 115, 6764-6774 (2001)

P30 Functionalized Graphene Nanoporous Network As An Organic Topological Insulator

A. Hallal^{1,2,*}, J. Landers^{1,2}, J. Coraux^{1,2}, M. De Santis^{1,2}, N. Bendiab^{1,2}, S. Lamare³, L. Magaud^{1,2} and F. Chérioux³.

¹ *Univeristy of Grenoble Alpes, Institut Néel, F-38042 Grenoble, FRANCE*

² *CNRS, Institut Néel, F-38042 Grenoble, FRANCE*

³ *Institut FEMTO-ST, Université de France-Comté, CNRS-ENSM, 32 Avenue de l'Observatoire, F-25044 Besançon, FRANCE*

* *ali.hallal@neel.cnrs.fr*

ABSTRACT

Graphene received considerable attention because of its exotic properties and wide range of possible applications. Using specific metal substrate and the right organic molecules one can self assemble Graphene islands and even Graphene nano-ribbon with controlled edges [1,2]. This bottom-up approach can also be used to create graphene nanoporous layers.

Up to now, experimental realization of graphene nanoporous network are mostly based on top-down approach and relied on lithography performed on graphene sheets [3]. We report here a convergent surface polymerization reaction scheme on Au(111), based on a triple aldol condensation, yielding a purely carbon, covalent nanoporous two-dimensional network whose formation and structure are studied with scanning tunneling microscopy [4].

Ab initio calculations including van der Waals interactions have been performed on the free standing network as well as on the network on Au(111). The electronic structure of the free standing network shows Kagome lattice like features: flat band and bands with linear dispersion together with a wide band gap. The possibility to enhance spin-orbit coupling in the system and then to turn it into a topological insulator will be discussed

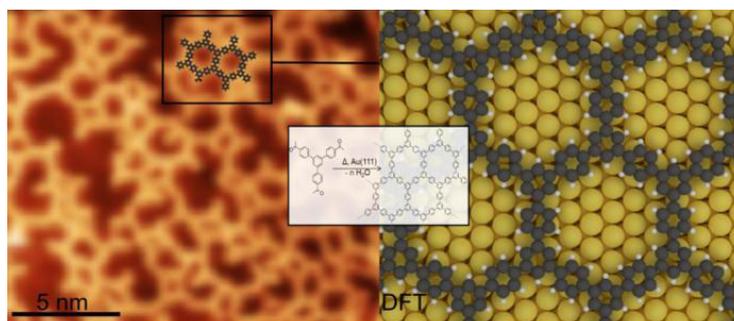


Fig. 1: Scanning tunnel microscopy (STM) image of a fully conjugated carbon network synthesized on Au(111). (Right) Density functional theory (DFT) calculations showing the stable structure on Au(111) (left). Middle inset shows the reaction based on a novel convergent approach via a triple aldolisation.

REFERENCES

1. J. Cai, P. Ruffieux, R. Jaafar, M. Bieri, T. Braun, S. Blankenburg, M. Muoth, A. P. Seitsonen, M. Saleh, X. L. Feng, K. Mullen and R. Fasel *Nature* 466, 470 (2010).
2. P. Han, K. Akagi, F. F. Canova, H. Mutoh, S. Shiraki, K. Iaway, P. S. Welss, N. Asao and T. Hitosugl, *ACS. Nano.* 8, 9181 (2014).
3. J. W. Bai, X. Zhong, S. Jiang, Y. Huang and X. F. Duan, *Nat. Nanotechnol.* 5, 190 (2010).
4. J. Landers, J. Coraux, M. De Santis, S. Lamare, L. Magaud and F. Chérioux, *2D Mater.* 1, 034005 (2014).

P31 Theory Of Ballistic Electron Emission Microscopy

Yann Claveau^{1,*}, S. Di Matteo², P. De Andres³, F. Flores⁴

1 groupe Matériaux Cristallins sous Contraintes, Centre d'élaboration de matériaux et d'études structurales (CEMES) Toulouse, France

*2 Département Matériaux et Nanosciences,
Institut de Physique de Rennes, Université de Rennes 1,
Rennes, France*

*3 Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada Universidad Autónoma de Madrid, Spain 4
Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (CSIC), Spain*

** yann.claveau@cemes.fr*

ABSTRACT

Ballistic Emission Electron Microscope (BEEM), derived from STM, was initially dedicated to fundamental characterization of Schottky contacts, and, to the study of the electronic properties of nano-objects (wells and quantum dots). Nowadays, it is used in the field of spintronics that is currently enjoying an increased activity. BEEM measurements, under magnetic field, provide access to the spin dependent transport of hot electrons, in GMR devices. Jointly with the experimental study of the Fe/Au/Fe/GaAs(100) spin valve, lead by M. Hervé and P. Turban, a Green's function theoretical approach has been developed in order to describe the transport of hot electrons in metals and their injections in the semi-conductor. This approach is based on Keldysh formalism as in Ref. [1], however we have extended the model in order to describe thin structures and/or heterostructures.

This new approach predicts quantum effects in ultra-thin slabs (which was impossible with the previous model) as shown here for Au/Si. Besides this new thickness effect, it is also possible with this model to describe spin polarized experiments. This is illustrated here for the Fe/Au/Fe spin-valve.

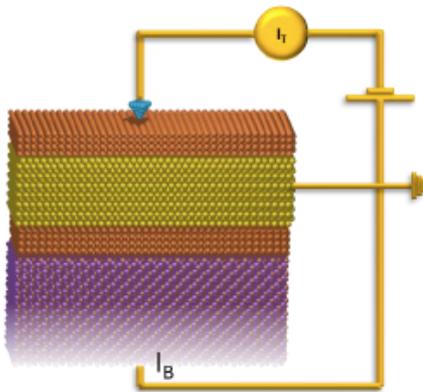


Fig. 1 : BEEM is derived from STM. Electrons are injected with a STM tip and collected at the back of the semi-conductor (here in purple). The Schottky barrier at metal/semi-conductor interface allows to image this interface.

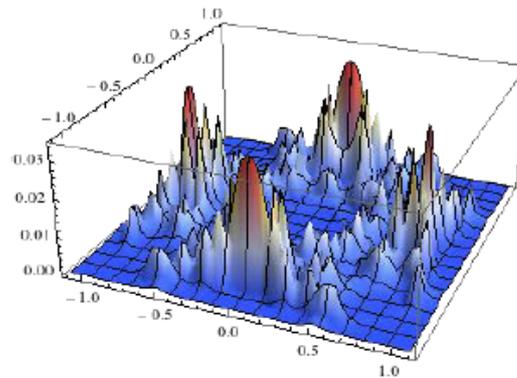


Fig. 2 : Distribution of the elastic current in the 2D Brillouin zone for Fe/Au/Fe in parallel configuration.

REFERENCES

1. P.L. de Andres, F.J. Garcia-Vidal, K. Reuter, F. Flores, *Prog. in Surf. Sci.* **66**,3-51(2001).

P32 *In situ* X-ray scattering investigations on SiGe nanowires: growth, strain and dance

Gilles RENAUD¹, Valentina CANTELLI¹, Olivier ULRICH¹, Olivier GEAYMOND² and Nils BLANC²

1 Univ. Grenoble Alpes, CEA/INAC/SP2M, F-38000 Grenoble, France

2 Continue Here1 Univ. Grenoble Alpes, CEA/INAC/SP2M, F-38000 Grenoble, France

** gilles.renaud@cea.fr*

ABSTRACT

The INS (In situ - Nanostructure - Surface/interface) end station of the BM32 beamline at the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) has been used for years to analyse the structural properties of nanoparticles *in situ*, in ultra-high vacuum (UHV), during their growth by molecular beam epitaxy, combining Grazing Incidence X-ray Diffraction (GIXD) and Grazing Incidence Small Angle X-ray Scattering (GISAXS) [1]. An UHV-Chemical Vapour Deposition (CVD) injection system has been recently added to allow investigation of the growth of Si/Ge nanowires (NWs) using disilane and digermane gas sources [2].

Results on the growth of Si NWs on Si(111) will first be presented, as a demonstration of the *in situ* capability of the instrument. The real time NWs length and their size distribution can be measured with X-ray techniques without removing the sample from the UHV chamber. The deposition of the metal catalysts and the injection of the precursor gases are carried out side by side, which makes it possible to probe the very early stage of growth. The well-known sidewall dodecagon sawtooth faceting is clearly recognizable from reciprocal space mapping of both GIXD and GISAXS.

The strain relaxation in Si-Ge core-shell NWs will then be presented. The samples are kept under UHV during the entire process to avoid oxidation and contamination. The level of strain is measured *in situ* as a function of the overgrowth amount. The composition distribution in the heterostructure is also determined using anomalous X-ray scattering [3].

Finally, results on the deformation of as-grown NWs by oriented deposition of various materials on one side of the NWs will be presented. The NWs dance back and forth with increasing amount of deposition as revealed by live stationary measurements with a 2D detector. The magnitude of the stress can then be deduced by analysing dedicated reciprocal space maps [4].

REFERENCES

1. G. Renaud, R. Lazzari, F. Leroy Surf. Sci. Rep. (2009) 64, 255.
2. V. Cantelli, O. Geaymond, O. Ulrich, T. Zhou, N. Blanc and G. Renaud, submitted.
3. T. Zhou, O. Geaymond, G. Renaud, in preparation.
4. T. Zhou, G. Renaud et al. in preparation.

P33 Étude expérimentale et théorique de la migration de joints de grains couplée à un cisaillement

Armin Rajabzadeh, Marc Legros, Frédéric Momprou et Nicolas Combe
*1 Centre d'Elaboration de Materiaux et d'Etudes Structurales, CNRS UPR 8011,
29 rue Jeanne Marvig, BP 94347, 31055 Toulouse cedex 4, France
2 Université de Toulouse, UPS, F-31055 Toulouse, France*

La déformation plastique des matériaux est généralement induite par le déplacement de dislocations. Cependant dans les matériaux nanocristallins, ces déplacements sont inhibés et les mouvements des joints de grains jouent alors un rôle important dans la plasticité. La migration des joints de grains couplée au cisaillement est un mécanisme efficace mis en évidence lors de sollicitations mécaniques dans différents matériaux: le joint de grains se déplace perpendiculairement à son plan en réponse à une contrainte de cisaillement. Malgré de nombreux efforts expérimentaux et théoriques ces dernières années, les mécanismes élémentaires de la migration des joints de grains couplée au cisaillement restent méconnus.

Nous étudions ces mécanismes élémentaires expérimentalement par microscopie électronique en transmission (MET) et théoriquement par simulation atomistique. Des expériences de traction in-situ en MET portant sur des bicristaux d'Aluminium chauffés à 400 °C montrent qu'un joint de grains $\Sigma 41$ (540) se déplace par le mouvement collectif de macro-marches le long de l'interface. Ces macro-marches sont caractérisées par la mesure de leur déformation [1]. Des marches élémentaires, composant vraisemblablement les macro-marches ont été également observées. L'observation par MET haute résolution de ces marches élémentaires a permis de les identifier comme des disconnections. Elles sont caractérisées par leurs hauteurs et leurs vecteurs de Burgers [2].

Par ailleurs, la migration des joints de grain couplée au cisaillement est étudiée par simulation atomistique dans un bicristal de Cuivre contenant un joint de grains symétrique $\Sigma 13$ (320). Le chemin de moindre énergie lors de la migration est déterminé en utilisant la méthode Nudged Elastic Band. L'évolution du joint de grains lors de sa migration montre la nucléation et le déplacement de marches, identifiées comme des disconnections, en bon accord avec les résultats expérimentaux. La barrière d'énergie pour la nucléation des disconnections est environ 11 fois plus élevée que la barrière d'énergie pour leur déplacement. [3]

REFERENCES

1. A. Rajabzadeh, M. Legros, N. Combe, F. Momprou and D.A. Molodov, D, Phil. Mag., 93, 1299 (2013)
2. A. Rajabzadeh, F. Momprou, S. Lartigue-Korinek, N. Combe, D.A. Molodov and M. Legros, Acta Materialia, 77, 223-235 (2014)
3. A. Rajabzadeh, F. Momprou, M. Legros, and N. Combe, Phys. Rev. Lett., 110, 265507 (2013)

P34 Caractérisation de jauges de contrainte à nanoparticules par diffusion de rayons X aux petits angles couplée à des mesures électromécaniques

Lucas Digianantonio,¹ Mélanie Gauvin,¹ Nicolas Decorde,¹ Neralagatta M. Sangeetha,¹ Thomas Alnasser,¹ Benoit Viallet,¹ Guillaume Viau,¹ Jérémie Grisolia,¹ Alessandro Coati,² Alina Vlad,² Yves Garreau,^{2,3} et Laurence Ressier,^{1,*}

¹ Université de Toulouse, LPCNO, INSA-CNRS-UPS, 135 avenue de Rangueil, Toulouse 31077, France. Fax: +33561559697; Tel:+33561559672

² SYNCHROTRON SOLEIL, L'Orme des Merisiers Saint-Aubin - BP 48, Gif-sur-Yvette 91192, France

³ Université Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, MPQ, UMR 7162 CNRS, Paris 75013, France

* laurence.ressier@insa-toulouse.fr

RESUME

Cette étude porte sur la caractérisation de jauges de contrainte à nanoparticules par des mesures de diffusion de rayons X aux petits angles en incidence normale (SAXS), couplée à des caractérisations électromécaniques macroscopiques. Ces jauges de contrainte sont constituées d'une assemblée compacte, mono ou multicouche, de nanoparticules d'or de 14 nm de diamètre déposées sur un substrat souple de polyimide par assemblage convectif capillaire. Le fonctionnement de ces capteurs résistifs est basé sur la variation de conduction électrique dans l'assemblée de nanoparticules soumise à une déformation mécanique. Chaque nanoparticule est entourée de ligands organiques qui constituent une barrière électrique mince. Le courant passe entre les nanoparticules à travers ces barrières par effet tunnel. En première approximation, la résistance tunnel ayant une dépendance exponentielle avec la largeur de la barrière, la résistance globale de l'assemblée de nanoparticules varie de manière exponentielle avec la déformation, ce qui confère à ces capteurs une extrême sensibilité comparée aux jauges de contrainte métalliques conventionnelles. Ce travail, présentant les mesures de SAXS réalisées sur des jauges de contrainte à nanoparticules sollicitées mécaniquement *in situ* sur la ligne SIXS du synchrotron Soleil, montrera comment la corrélation des variations macroscopiques de résistance électrique des jauges de contrainte aux déplacements relatifs des nanoparticules à l'échelle nanométrique avec la déformation, offre une compréhension fine du fonctionnement physique de ces capteurs innovants.

REFERENCES

- [1] C. Farcau, N.M. Sangeetha, H. Moreira, B. Viallet, J. Grisolia, D. Ciuculescu-Pradines & L. Ressier, *ACS Nano*, 5, 7137-7143, (2011)
- [2] N.M. Sangeetha, N. Decorde, B. Viallet, G. Viau & L. Ressier, *J. Phys. Chem. C*, 117, 1935–1940, (2013)
- [3] N. Decorde, N. M. Sangeetha, B. Viallet, G. Viau, J. Grisolia, A. Coati, A. Vlad, Y. Garreau & L. Ressier, *Nanoscale*, 6, 15107-15116, (2014)

P35 Nanofils d'or ultrafins : mécanisme de croissance et étude de stabilité

L.-M. Lacroix,^{1,*} M. Impéror-Clerc,² R. Arenal,³ L. Ressler,¹ G. Viau¹

¹ Université de Toulouse, LPCNO UMR 5215 CNRS INSA UPS, Toulouse

² Laboratoire de Physique de Solides, UMR 8502, Université Paris-Sud, Orsay

³ Laboratorio de microscopias avanzadas, Instituto de Nanociencia de Aragon, U. Zaragoza, Spain *
lmlacroix@insa-toulouse.fr

ABSTRACT

Récemment, les nanofils d'or ultrafins (NFs) préparés par voie chimique en présence d'oleylamine ont attiré beaucoup d'intérêt en raison de leur morphologie unique (diamètre 1,7 nm, longueur micrométrique) [1] suscitant des perspectives d'applications variées [2,3]. Leur caractéristique 1D leur confère des propriétés de conductivité remarquables [4], mais l'étude de leurs propriétés électroniques sur objet unique reste un défi technologique. Une étude SAXS (Diffusion des Rayons X aux petits angles) et XPS nous a permis de décrire l'auto-assemblage de NFs dans un super-réseau hexagonal avec un paramètre de 9,7 nm bien expliqué par la présence d'une bicouche de chlorure d'oleylammonium (OY+Cl⁻)/ oleylamine (OY), suggérant un mécanisme de croissance micellaire 1D [5]. Nous avons montré que les NFs solubilisés dans l'hexane présentent une charge négative en présence d'un champ électrique, en raison de la réorganisation des ions OY⁺. L'injection localisée de charges positives sur une surface par nanoxérographie AFM, nous a ainsi permis de déposer des NFs isolés grâce à un assemblage dirigé par force électrostatique. La stabilité de tels fils uniques a été étudiée in situ par STEM HAADF [6]. Sous irradiation électronique, les NFs ont tendance à se fragmenter via des chaînes atomiques comme état transitoire. La modification de l'énergie de surface du fil, par un échange de ligands, pourrait permettre de stabiliser davantage ces états transitoires, ouvrant ainsi une perspective intéressante pour des mesures de transport électronique sur fils isolés.

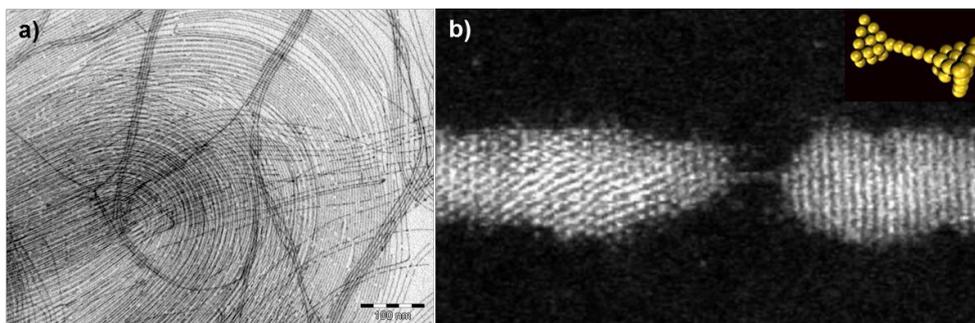


Figure 1. Images a) TEM et b) HAADF-STEM de fils d'or. Chaîne monoatomique formée lors de la fragmentation du fil sous faisceau électronique.

REFERENCES

1. H. Feng et al, *Chem. Comm.*, 1984 (2009)
2. Y. Chen et al., *Adv. Mater.* 25, 80 (2013)
3. J. Xu et al. *J. Am. Chem. Soc.* 132, 11920 (2010)
4. A. Loubat et al. *Nano Res.*, 6, 644 (2013)
5. A. Loubat et al. *Langmuir*, 30, 4005 (2014)
6. L.-M. Lacroix, R. Arenal, G. Viau, *J. Am. Chem. Soc.*, 136, 13075 (2014)

P36 SurfER: une extension originale pour la résonance magnétique électronique sous UHV

Jean-Louis Cantin^{1,*}, Marie d'Angelo¹, Jürgen von Bardeleben¹

*1 Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, UMR 7588,
Institut des Nano Sciences de Paris, F-75005, Paris, France*

** cantin@insp.jussieu.fr*

Nous avons développé à l'INSP une chambre sous ultra vide (pression de base $<2.10^{-11}$ mbar) permettant l'analyse par résonance magnétique électronique (Résonance Paramagnétique (RPE) ou Ferromagnétique (RFM)) d'échantillons sous ultra vide ou sous atmosphère contrôlée. Cette extension ; couplée à un spectromètre conventionnel fonctionnant en bande X (10GHz) ; permet par exemple l'étude de défauts ponctuels de surface de semiconducteurs et d'oxydes. Elle est également adaptée à l'étude des propriétés magnétiques de films ou multicouches ultra minces.

Nous exposerons les capacités de cette extension originale puisqu'il n'existe que deux autres systèmes similaires au monde. Le premier a été développé au Japon, à Tsukuba, par l'équipe de S. Yamasaki [1] du National Institute for Advanced Industrial Science and Technology et est couplé à un bâti de dépôt pour l'étude de liaisons pendantes de Si durant la croissance de silicium amorphe hydrogéné. Le second, situé en Allemagne, à Berlin, est utilisé par l'équipe de H.J. Freund [2] du Dept. Chemical Physics du Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft pour l'étude de propriétés catalytiques des surfaces d'oxydes.

Les possibilités offertes par l'extension SurfER (SURFace Electron Resonance) de l'INSP sont multiples (Fig.1) et reposent sur l'existence d'un sas d'introduction rapide, d'un système de chauffage de l'échantillon par passage de courant, d'un LEED/Auger pour le contrôle des surfaces, de vannes de fuites et d'évaporateurs pour la modification des surfaces. Elles sont mises à profit à l'INSP pour l'étude de systèmes variés para ou ferro magnétiques tels que les liaisons pendantes de surfaces reconstruites de Si, ou de molécules aimants.

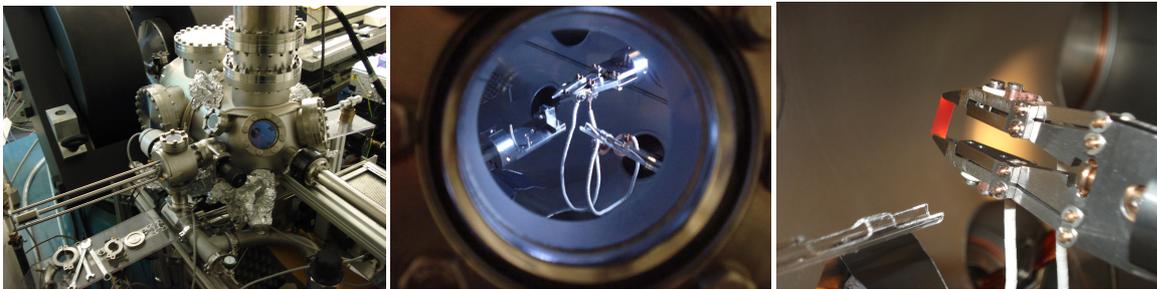


Fig. 1 : Photos de l'extension SurfER de l'INSP.

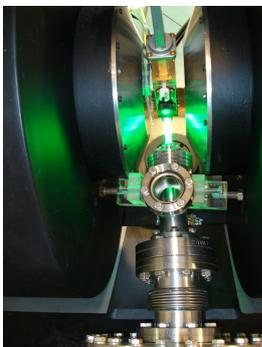


Fig. 2 : Possibilité d'excitation optique in situ

References

1. S. Yamasaki et al. PRB 63, 245204 (2001), Thin Solid Films 407, 139 (2002) JAP 99, 083305 (2006), APL 86, 264104 (2005), APL 81, 1773 (2002)
2. H.J. Freund et al, PRL 94, 186101 (2005), Surface Science 527 (2003), PRL 96, 146804 (2006), PRL 94, 186101 (2005)

P37 Propriétés mécaniques et structurales des encapsulants polymères utilisés en microélectroniques : effets de la température et de l'humidité

AYCHE KENZA^{1,*} Nicolas DELORME¹, Jean François BARDEAU¹, Pascal RUELLO¹,
Jean François PILARD¹

*1 Institut des Molécules et Matériaux du Mans (IMMM), UMR CNRS 6283
Faculté des Sciences et Techniques, Avenue Olivier Messiaen - 72085 LE MANS Cedex 9*

** kenza.ayche@univ-lemans.fr*

L'engouement mondial pour les appareils nomades et la course à la sobriété énergétique font de la diminution de la taille des systèmes microélectroniques (MEMS) un enjeu majeur pour les prochaines années. Les micro-batteries au lithium sont aujourd'hui le moyen le plus efficace pour stocker et alimenter des dispositifs avec une très forte densité énergétique. Les incorporer dans des cartes de crédit comportant un écran et des touches intégrés est l'un des défis que relèvent les multinationales comme ST Micro Electronics.

Ces micro-batteries contiennent cependant du lithium métallique qui peut s'avérer très dangereux quand il est en contact avec de l'eau ou de l'air humide. Ainsi, afin de protéger les composants à une exposition à l'humidité, à la chaleur ou à une contrainte mécanique, une encapsulation de l'ensemble de la batterie est nécessaire. L'encapsulation polymère a l'avantage, comparativement à d'autres matériaux (céramique, métal), de présenter un faible coût de mise en forme et un faible poids.

L'objectif de nos travaux est de réaliser et d'étudier le comportement mécanique et structural d'assemblage de couches minces de polymères et de métaux en température et en humidité. Deux types de polymères ont été choisis pour ce projet :

1. Le chlorure de polyvinylidène (PVDC), un polymère commercial très utilisé pour ses bonnes propriétés barrières à l'eau. Nous l'avons utilisé comme matériau de référence.

2. Un oligomère acrylate synthétisé au sein de l'IMMM à partir du recyclage du caoutchouc qui présente de bonnes propriétés barrières mais qui possède également des propriétés mécaniques intéressantes. En effet, lors de l'insertion et la désinsertion des ions lithium dans la micro batterie, les électrodes subissent une expansion volumique importante. Le polymère choisi doit donc être assez élastique pour absorber ce mouvement. L'intérêt technologique de cet oligomère c'est qu'il peut se réticuler thermiquement ou sous l'effet d'une irradiation photonique.

La spectroscopie Raman et la spectroscopie Infrarouge sont utilisées pour étudier et comprendre la cinétique de réticulation de l'oligomère en fonction des conditions expérimentales. Les mesures ont été effectuées sur des échantillons présentant différents temps d'irradiation (de 0 à 45 min) et différents paliers de température (de l'ambiante à 120°C). Les spectres vibrationnels obtenus permettent de détecter la diminution des intensités intégrées des pics caractérisant les doubles liaisons C=C, ce qui traduit le début de la réaction de réticulation. Différentes conditions de dépôts sont aujourd'hui testées.

En outre, la microscopie à force atomique a permis de réaliser des mesures de forces sur des échantillons réticulés et non réticulés. La technique a permis de mesurer l'adhésion entre la pointe AFM et le film et nous a permis de comparer la rigidité des films obtenus.

La caractérisation des dépôts obtenus et la compréhension de la cinétique de réticulation vont donc nous permettre de prédire le comportement de l'oligomère dans le temps dans les différentes conditions de température et d'humidité de la micro-batterie.

P38 Dissolution and oxidation process of a silicene layer forming a $(2\sqrt{3}\times 2\sqrt{3})R30^\circ$ and a (4×4) structure on Ag(111)

H. Maradj^{1,2}, B. Parditka^{3,4}, J-Y. Hoarau¹, B. Ealet¹, H. Jamgotchian¹, J-P. Bibérian¹, M. Ghamnia², and B. Aufray¹

¹ Aix-Marseille Université, CNRS, CINaM, UMR 7325, 13288 Marseille, France

² LSMC, Université d'Oran es-sénia, 31100, Oran, Algérie

³ Aix-Marseille Université, CNRS, IM2NP, UMR 7334, 13397 Marseille, France

⁴ Department of Solid State Physics, University of Debrecen, H-4026 Debrecen, Hungary
maradj@cinam.univ-mrs.fr

Abstract:

Silicene, a single atomic layer of silicon with a honeycomb atomic structure (equivalent of graphene), is today extensively studied in relation to its important potential applications. Many studies of silicene layers are performed after deposition of silicon on silver substrates (in ultra-high-vacuum conditions). On Ag(111) face, the deposition of one silicon monolayer gives rise to different superstructures (4×4) , $(\sqrt{13}\times\sqrt{13})R13.9^\circ$, $(2\sqrt{3}\times 2\sqrt{3})R30^\circ$ and $(\sqrt{7}\times\sqrt{7})R19.1^\circ$. All these superstructures (and the corresponding STM images) have been explained by a silicon mono layer in a honeycomb structure (silicene) rotated to different angles with respect to the silver substrate. The existence of these superstructures are strongly correlated to the growth conditions (substrate temperature and deposition rate)¹. The $(2\sqrt{3}\times 2\sqrt{3})R30^\circ$ superstructure is formed at the highest growth temperature ($>300^\circ\text{C}$) and the (4×4) at the lowest (180°C). In order to understand the role played by the deposition rate we have studied the behavior of both superstructures with temperature. Using AES (Auger Electron Spectroscopy), LEED (Low Energy Electron Diffraction) and STM (Scanning Tunneling Microscopy) we show that there is a dissolution process of silicon in the silver substrate at 390°C . This unexpected dissolution process is in line with (i) the required use of a high silicon deposition rate to obtain the $(2\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ superstructure¹ and (ii) the recent observations by Low Energy Electron Microscopy (LEEM) of the disappearance of the silicene layer interpreted by a de-wetting^{2,3}. We use the dissolution kinetics of the (4×4) superstructure recorded at 390°C , to derive an estimation of the limit of the solubility of silicon in Ag at this temperature. Finally we show that the silicon dissolution in silver can be limited by a soft oxidation process of the silicene layer. We observed by STM that the 2D “silicene oxide” which is stable up to 600°C , is only ordered at short distance.

¹ H. Jamgotchian, Y. Colignon, N. Hamzaoui, B. Ealet, J.Y. Hoarau, B. Aufray, and J.P. Bibérian, Journal of Physics: Condensed Matter : an Institute of Physics Journal 24, 172001 (2012).

² a. Acun, B. Poelsema, H.J.W. Zandvliet, and R. van Gastel, Applied Physics Letters 103, 263119 (2013).

³ P. Moras, T.O. Mentis, P.M. Sheverdyeva, A. Locatelli, and C. Carbone, Journal of Physics: Condensed Matter 26, 185001 (2014).

P39 A novel method to study bio-available silver released from a layer of AgNPs embedded in silica matrix

A. Pugliara^{1,2*}, K. Makasheva², B. Despax², M. Bayle¹, R. Carles¹, P. Benzo¹, G. BenAssayag¹, B. Pécassou¹, M.-C. Sancho³, E. Navarro³, Y. Echegoyen⁴ and C. Bonafos¹

1 CEMES-CNRS; Université de Toulouse, 29 rue Jeanne Marvig, 31055 Toulouse

2 LAPLACE, Université de Toulouse; UPS, INPT, CNRS;;118 route de Narbonne, 31062 Toulouse

3 IPE-CSIC; Avda. Montañana 1005, Zaragoza 50059, Spain.

4 I3A, Department of Analytical Chemistry; University of Zaragoza;

C/ María de Luna 3, 50018, Zaragoza, Spain.

**Corresponding author: alessandro.pugliara@cemes.fr, alessandro.pugliara@laplace.univ-tlse.fr*

The strong antibacterial efficiency of silver nanoparticles (AgNPs) makes them widely used in health-care sectors. The small size and huge surface-volume ratio of AgNPs facilitate the silver release, compared to the bulk material, leading to an increased toxicity for organisms sensible to silver [1, 2]. The bio-available silver released from a layer of small AgNPs (diameter < 20 nm) embedded in silica (SiO₂) film is assessed in this work.

Two approaches were used to elaborate nanocomposite structures: (I) Low Energy Ion Beam Synthesis (LE-IBS) using an implanter modified to work in the low energy range (0.6 - 20 keV) [3]; (II) combined silver sputtering and Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition (PECVD) by using the plasma of an axially asymmetric RF (13.56 MHz) discharge. The discharge was maintained in hexamethyldisiloxane - oxygen - argon mixtures at low gas pressure (< 7 Pa) [4].

Both techniques allow fabricating a single layer of AgNPs embedded in SiO₂ films at controlled nanometric distances from the free surface. Structural and optical properties of these nanocomposite structures were studied by Transmission Electron Microscopy (TEM) and by ellipsometry or optical reflectance spectroscopy [5], respectively. On another hand, by using fluorometry, the short-term toxicity of embedded AgNPs to photosynthesis in *Chlamydomonas reinhardtii* was exploited to determine the bio-available silver release. In addition, the total silver release was measured through inductively coupled plasma mass spectrometry. Results from these analyses reveal that AgNPs embedded into a SiO₂ layer protect them from fast oxidation [6], even after buffered water immersion. Finally, the novel design of these nanocomposite structures allows modulating the silver release by changing the distance between the single layer of the embedded AgNPs and the free surface.

[1] E. Navarro, F. Piccapietra, B Wagner, F. Marconi, R. Kaegi, N. Odzak, L. Sigg and R. Behra, *Environ. Sci. Technol.*, 42, 8959-8964, 2008.

[2] B. Despax, C. Saulou, P. Raunaud, L. Datas and M. Mercier-Bonin, *Nanotechnology*, 22, 175101, 2011.

[3] P. Benzo, C. Bonafos, M. Bayle, R. Carles, L. Cattaneo, C. Farcau, G. BenAssayag, B. Pécassou and D. Muller, *J. Appl. Phys.*, 113, 193505, 2013.

[4] B. Despax and P. Raynaud, *Plasma Process. Polym.*, 4, 127-134, 2007.

[5] R. Carles, C. Farcau, C. Bonafos, G. BenAssayag, M. Bayle, P. Benzo, J. Groenen and A. Zwick, *ACS Nano*, 5, 8774-8782, 2011.

[6] P. Benzo, L. Cattaneo, C. Farcau, A. Andreozzi, M. Perego, G. BenAssayag, B. Pécassou, R. Carles and C. Bonafos, *J. Appl. Phys.*, 109, 103534, 2011.

P40 High-k stacked dielectrics for non-volatile memory application

L. Khomenkova^{1,5}, P. Normand², P. Dimitrakis², E. Kapetanakis², M. Carrada¹,
F. Gourbilleau³, A. Slaoui⁴, C. Bonafos¹

¹CEMES/CNRS, Université de Toulouse, 29 rue J. Marvig 31055 Toulouse Cedex 4, France

²IMEL / NCSR Demokritos, 153 10 Aghia Paraskevi, P.O.Box 60228, Athens, Greece

³CIMAP, CEA/CNRS/ENSICAEN/UCBN, 6 Blvd Marechal Juin, 14050 Caen Cedex 4, France

⁴ICube, 23 rue du Loess, BP 20 CR, 67037 Strasbourg Cedex 2, France

⁵V.Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics, 45 Pr.Nauky, 03028 Kyiv, Ukraine

Introduced in the late sixties, the charge trapping memories have significantly evolved in design and performance over the years from the early MNOS device technology. In addition to their advantages in terms of scalability and fabrication requirements (and thus in production costs), they benefited from remarkable advances in thin film technology and charge-trap engineering, which have increased their potential for mass applications. They are particularly attractive for the further development of ultra-scaled non-volatile memories for both standalone and embedded applications. In the present work, we report on the fabrication and characterization of high-k stacked dielectric structures based on the combination of Hf-based materials and silicon nitride. The structures with double (SiN/HfO₂/p-Si and SiN/HfSiO/p-Si) stacked layers were grown by RF magnetron sputtering and/or chemical vapor deposition techniques. They were investigated by means of spectroscopic ellipsometry, FTIR-ATR and high-resolution TEM methods versus deposition conditions and further thermal annealing. To study the electrical properties of the samples, face- and back-side Al contacts were formed by thermal evaporation.

The structural analysis of all the samples revealed a smooth surface with a roughness below 1 nm and abrupt interfaces between the different stacked layers (Fig.1a). No crystallization of Hf-based layers was observed for all annealed structures. This means that neither the formation of grain boundaries in HfO₂ layers nor phase separation in HfSiO ones occurred upon annealing. This structural stability can offer promised electrical properties and results in low leakage current.

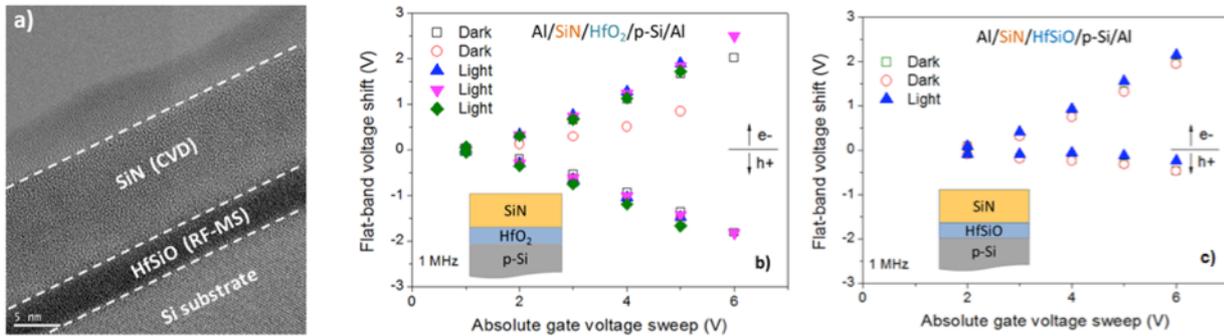


Figure 1. a) High-resolution TEM bright field images for double SiN/HfSiO structure; (b,c) extracted flat-band voltage shift as a function of the gate voltage sweep for SiN/HfO₂ (b) and SiN/HfSiO (c) structures. An annealing was performed at 800°C for 30 min in N₂ flow.

C-V characteristics of the samples showed a good uniformity along the wafers. No substantial difference in C-V data under light and dark conditions was observed. Besides, a strong charging effect was demonstrated under double voltage sweep conditions (Fig.1b,c). For the SiN/HfO₂ samples, charging effect is due to both electron and hole injection from the substrate, whereas for the SiN/HfSiO structures it was caused mainly by electron injection from the substrate. Additional investigations are ongoing to draw safe conclusions regarding the location and the retention time of the trapped charge. An application of the stacked samples for NVMs with Ge-ncs was also investigated. For this purpose, the Ge-ncs were created inside the SiN layers by means of Ge ion implantation followed by thermal treatment. Their structural and electrical properties were studied and will be also discussed.

P41 PREPARATION DE MATERIAUX POREUX A PARTIR D'EMULSIONS

A. HAMBARDZUMYAN^{1*}, T. DEVERS^{1,2}, F. MEDUCIN¹, S.GUILLOT¹,
1ICMN UMR7374, 1b rue de la fêrrollerie, 45071, CS 40059, ORLEANS, France Cedex 2
2ICMN, site de Chartres, EA 4229 Université d'Orléans, 21 rue de Loigny la Bataille, 28000
Chartres, France

*LE STUDIUM® Loire Valley Institute for Advanced Studies, 1 Rue Dupanloup-45000
Orléans - France

arayik.hambardzumyan@cnsr-orleans.fr

ABSTRACT

Les matériaux poreux présentent un grand intérêt dans différents domaines d'application comme la détection électrochimique, la filtration, la séparation des métaux lourds, l'ingénierie tissulaire et la culture cellulaire 3D..., et ceci grâce à leur grande surface spécifique, haute perméabilité, faible densité et porosité élevée [1,2]. Dans le cadre de la recherche de valorisation des polymères naturels, nous avons préparé de nouveaux matériaux poreux par évaporation d'émulsions stabilisées avec des macromolécules naturelles issues des produits agricoles [3]. Ces matériaux ont été préparés sans modification chimique ou fonctionnalisation des bio-polymères mais par simple évaporation de l'émulsion huile/eau. Il a été démontré que les tailles des pores des matériaux formés dépendent des propriétés physico-chimiques de la phase huileuse de l'émulsion. Par différentes techniques une corrélation directe entre les points d'ébullitions de phase organique des émulsions et la structure de la couche d'adsorption est démontrée (fig. 1) (phase organique très volatile (A) et peu volatile (B)).

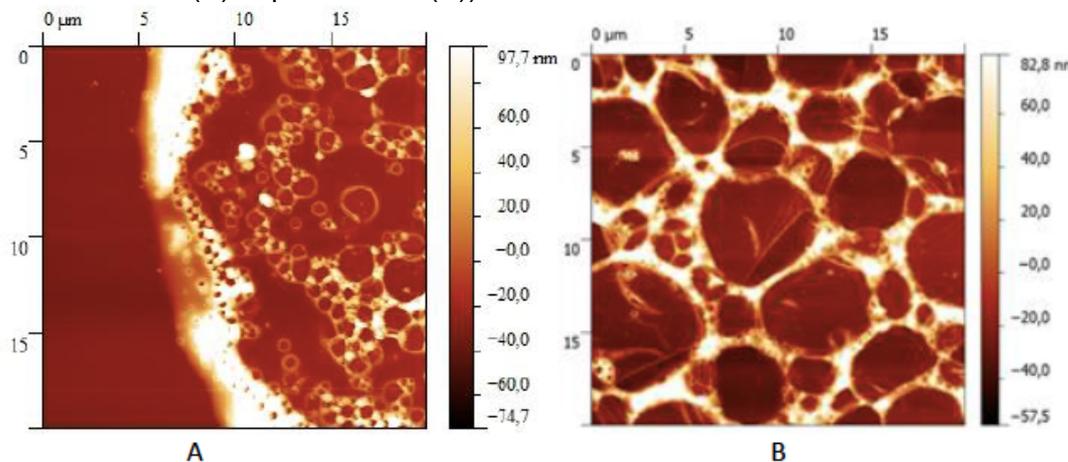


Fig. 1 : Images AFM des émulsions huile/eau avec des phases organique de volatilité différentes. Les émulsions sont stabilisées avec un polymère naturel et spin-coatées sur le silicium (phase organique très volatile (A) et peu volatile (B)).

REFERENCES

1. Scott D. Kimmins and Neil R. Cameron, *Adv. Funct. Mater.*, 2011, 21, 211-225.
2. P.A.G. Cormack, A. Devies, N. Fontanals, *React. Funct. Polym.*, 2012, 72, 939-946.
3. A. Hambardzumyan, L. Foulon, N.B. Bercu, M. Pernes, J.E. Maigret, M. Molinari, B. Chabbert, V. Aguié-Béghin, *Chemical Engineering Journal*, 2015, 264, 780-788.

P42 Influence de l'adsorption d'une couche d'alkanethiols sur le magnétisme d'un film de cobalt

P. Campiglio, R. Breitwieser, V. Repain, C. Chacon, A. Bellec, J. Lagoute, Y. Girard, et S. Rousset

Laboratoire MPQ, UMR 7162, Université Paris Diderot et CNRS, 10 rue A. Domon et L. Duquet, 75205 Paris Cedex

La compréhension du couplage entre une couche moléculaire et une électrode magnétique est un élément central de l'électronique de spin moléculaire. La terminaison thiol (SH) est connue pour être particulièrement réactive avec les métaux et former des monocouches auto-assemblées, par exemple dans le cas d'alkanethiols sur or. Nous avons donc choisi d'étudier l'influence de ces molécules sur le magnétisme d'un substrat de cobalt.

Nous avons étudié la modification du magnétisme du cobalt par magnéto-optique in situ lorsqu'une couche d'octanethiols ou de dodécaneethiols est déposée sur des films ultraminces Co/Au(111). La couche moléculaire peut induire une transition de réorientation de l'aimantation, favorisant l'aimantation hors plan et semble également réduire l'aimantation du film. Une étude STM montre que ces modifications s'accompagnent d'une augmentation de la rugosité de surface et que la couche moléculaire est nettement moins bien ordonnée que sur une surface d'or. Des calculs ab initio réalisés dans l'équipe de S. Narasimhan à Bangalore montrent que l'influence d'un methanethiolate adsorbé sur une surface de Co est de légèrement diminuer l'anisotropie magnéto-cristalline et de diminuer les moments magnétiques de surface. Par ailleurs, les calculs montrent que la densité d'états du cobalt au niveau de Fermi est fortement affectée par la molécule, inversant même la valeur de la polarisation de spin.

P43 Enhanced magnetism in Gr/Co/Ir systems: an interplay of graphene and high temperatures

I. Carlomagno^{1,2}, J. Drnec², S. Vlais³, H. Isern², R. Felici², N. Rougemaille³ and J. Couraux³

1 Università di Roma Tre, Dipartimento di scienze, via della Vasca Navale, 84 00146 Roma, Italia

2 ESRF, 71 Avenue des Martyrs, 38000 Grenoble, France

*3 Institut Néel CNRS & Université Joseph Fourier, BP166, F-38042 Grenoble Cedex 9, France
llaria.carlomagno@esrf.fr*

ABSTRACT

Magnetic hybrid systems are gaining more and more attention thanks to their peculiar properties which are precious for applicative purposes. Among them, thin Co films show a perpendicular magnetic anisotropy (PMA) which is crucial for the new ultrahigh density memory devices[1]. Co films capped with graphene are prevented from oxidation, show enhanced PMA and also a peculiar magnetic behaviour due to graphene-Co coupling[2]. The capping process is relatively straightforward but the high temperatures required (500K) during Co intercalation may affect the Co/substrate interface and modify the system properties[1,3]. Detailed characterization of structure and morphology is then mandatory to reliably understand its magnetic response.

Here we report the results of an accurate study on thin Co films (thickness between 1 and 2.6 nm) growth on Ir (Co/Ir) and capped with Gr (Gr/Co/Ir). In this work state of the art synchrotron radiation probes (surface x-ray diffraction: SXRD) and complementary laboratory techniques were combined in order to characterize the structural modifications induced by the intercalation process and its influence on overall magnetism of the films. Complementary probes were applied to characterize the magnetic response (MOKE), depth resolved composition (XPS), crystallographic structure (LEED, XRD) and morphology (STM).

The investigation through SXRD, enlightens the phenomena occurring at the Co/Ir interface with and without intercalation: Co/Ir intermixing is observed to take place at lower temperatures after the intercalation procedure, furthermore the alloy formation is favoured in thinner films. The laboratory techniques confirms the thermal induced interdiffusion is related to the film thickness. Magnetic hysteresis show changes only when the quantity of Co involved in the diffusion is comparable to the film thickness.

These results allows to reveal the close relationship between magnetic response and the atomic scale modification (structural and chemical) induced by thermal treatments. These findings must be considered carefully tailoring optimal systems for applicative purposes.

REFERENCES

1. N. Rougemaille et al., Appl. Phys.Lett. 101, 142403 (2012)
2. R. Decker et al., Phys. Rev. B 87, 041403 (2013)
3. J. Couraux et al., J. Phys. Chem. Lett. 3, 2059 (2012)

P44 Emergence of chirality in hexagonally packed monolayers of hexapentyloxytriphenylene on Au(111): a joint experimental and theoretical study

Piotr Slezczkowski,^{1,2} Nathalie Katsonis,² Oleksiy Kapitanchuk,³ Alexandr Marchenko,⁴ Fabrice Mathevet,⁵ Bernard Croset¹, and [Emmanuelle Lacaze](mailto:emmanuelle.lacaze@insp.jussieu.fr)¹,

¹ *Institut des Nano-Sciences de Paris (INSP), CNRS-UMR7588, UPMC Univ Paris 06, Paris*

³ *Laboratory for Biomolecular Nanotechnology, MESA+ Institute for Nanotechnology, University of Twente, Enschede, The Netherlands*

³ *Bogolyubov Institute for Theoretical Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kiev, Ukraine*⁵

⁴ *Institute of Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kiev, Ukraine*

⁵ *UPMC Univ Paris 06, UMR 8232, Institut Parisien de Chimie Moléculaire, Equipe Chimie des Polymères, Paris, France*

emmanuelle.lacaze@insp.jussieu.fr

We investigate the unusual expression of chirality in a monolayer formed spontaneously by 2,3,6,7,10,11-pentyloxytriphenylene (H5T) on Au(111). We resolve its interface morphology by combining scanning tunnelling microscopy (STM) with theoretical calculations of intermolecular and interfacial interaction potentials. We observe two commensurate structures. While both of them belong to a hexagonal space group, analogical to the triangular symmetry of the molecule and the hexagonal symmetry of the substrate surface, they reveal a 2D chiral character. The corresponding breaking of symmetry arises for two reasons.

- First it is due to the establishment of a large molecular density on the substrate, which leads to a rotation of the molecules with respect to the molecular network crystallographic axes to avoid steric repulsion between neighboring alkoxy chains.

- Second it is due to the molecule-substrate interactions, leading to commensurable large crystallographic cells associated with the large size of the molecule.

As a consequence, molecular networks disoriented with respect to the high symmetry directions of the substrate are induced. The high simplicity of the intermolecular and molecule/substrate Van der Waals interactions leading to these observations suggests a generic character for this kind of symmetry breaking.

We demonstrate that, for similar molecular densities, only two kinds of molecular networks are stabilized by the molecule-substrate interactions. The most stable networks favors the interfacial interactions between terminal alkoxy tails and Au(111). The metastable ones favors a specific orientation of the triphenylene core with its symmetry axes collinear to the Au<110>. This specific orientation of the triphenylene cores with respect to Au(111) appears associated with an energy advantage larger by at least 0.26 eV with respect to the disoriented core [1].

References

1. P. Slezczkowski, et al., *Langmuir* **2014**, *30* (44), pp 13275–13282

P45 Chemical Vapor Deposition of diamond by array of microwave sources: nano and ultra-nano crystalline diamond

Olivier Antonin^{1,2*}, Ines Martinko², Yannick Engelmann², Patrice Raynaud^{2,3}, Thomas Nelis¹

olivier.antonin@bfh.ch

¹ Institute for Applied Laser, Photonics and Surface Technologies, Berne University of Applied Science, 21 Quellgasse, 2501 Bienne, Suisse.

² Université Paul Sabatier, Laboratoire Plasma et Conversion d'Énergie (LAPLACE), UMR 5213 – 118, route de Narbonne, F-31062 Toulouse, France.

³ CNRS, Laboratoire Plasma et Conversion d'Énergie (LAPLACE), UMR 5213 – 118, route de Narbonne, F-31062 Toulouse, France.

ABSTRACT

Most CVD diamond products are used for technical products in a niche market, because diamond cannot be deposited on substrates such as steel or polymer as the required deposition temperatures are around 800°C. First trials with a new microwave deposition technology just emerged from science so called MEPS-CVD (Matrix of Elementary Plasma Sources"- Chemical Vapor Deposition) [1, 2, 3] have shown that conformal 2D Nano-Crystalline Diamond (NCD) coatings can be deposited at temperature as low as 300°C, pressure below 100 Pa and on surfaces as large as 0.1 m².

In the MEPS design, multi microwave sources will be employed. Solid state μ -wave generators, operating at well-defined frequencies will be used to drive each source independently, to reach homogeneous deposition conditions, without using multiple mechanical impedance matching systems. At the lower pressure used in this development (1-10 Pa), the plasma is not in thermal equilibrium, i.e. the temperatures of the Neutral species, excited species, ions and electrons are different and to some extent can be controlled independently.

The scientific question is how this additional degree of freedom (non-thermal equilibrium plasma with species at different temperature) can be used to influence the diamond growth on a substrate sensible to high temperatures. It is therefore part of the work to optimize the gas-mixture, CO₂/CH₄/H₂ ratio and the addition of oxygen containing gases to optimize:

- a) The nucleation on the substrate (silicium, metals, polymers) in the very first deposition steps.
- b) NCD growth in the second phase of the NCD deposition.
- c) Fundamental insight into plasma processes. At low temperatures and pressures the plasma is not in the thermo-dynamic equilibrium. The production of atomic hydrogen and carbon containing radicals will be explored for the optimal conditions at low-temperature.
- d) Fundamental understanding of the microstructure, stress level and interface.

REFERENCES

- [1] L.Latrasse and al, Plasma Sources Sci. Technol. 16 (2007) 7–12
- [2] H-A. Mehedi and al, Diamond & Related Materials 47 (2014) 58–65
- [3] Neocat patents Swiss patent application (2013, March 28, IPI ref. n°0693/13)

Liste Participants

Nom	Prénom	Ville	Organisme	Contribution
Allongue	Philippe	Palaiseau	PMC CNRS	
Alvarez	Laurent	Montpellier	Laboratoire Charles Coulomb	O11
Andreazza	Caroline	Marcilly en Vilette	CRMD- CNRS	P28
Andreazza	Pascal	Marcilly en Vilette	CRMD- CNRS	P28
Andrieu	Stéphane	Vandoeuvre	Institut Jean Lamour	O1
Antonin	Olivier	Bienne		P45
Aqua	Jean-Noël	Paris	INSP	O3
Aubert	Arnaud	Houilles	ALTEC Equipment	
Ayche	Kenza	Le Mans	CNRS UMR6283	P37
Babonneau	David	Futuroscope Chasseneuil	UPR 3346 CNRS	P23, P25
Bellessa	Joël	Villeurbanne	ILM- univ -Lyon 1	O13
Benoit	Magali	Toulouse	CEMES-CNRS	P3
Benzo	Patrizio	Toulouse	CEMES-CNRS	P39
Blondel	Benoit	Toulouse	LAPLACE	
Bonafos	Caroline	Toulouse	CEMES-CNRS	P39, P40
Bouzouita	Donia	Toulouse	LPCNO	
Cantin	Jean Louis	Paris	UPMC	P36
Carlomagno	Ilaria	Grenoble	ESRF	P43
Casanove	Marie-Jose	Toulouse	CEMES-CNRS	P3
Chaudret	Bruno	Toulouse	LPCNO	P11, P12, P22
Cherifi	Salia	Strasbourg	CNRS IPCMS	
Chiali	Anisse	Tlemcen	Ecole Preparatoire en Sciences et Techniques de Tlemcen, Algérie	
Claveau	Yann	Toulouse	CEMES-CNRS	P16, P31
Coati	Alessandro	Gif sur Yvette	Synchrotron SOLEIL	O1, P28, P34
Colin	Jonathan	Chasseneuil	Université de Poitiers	P2, P7
Combe	Nicolas	Toulouse	CEMES-CNRS	P33
Crespo	Julian	Toulouse	LPCNO	
Croset	Bernard	Paris	INSP	P45
Cure	Jeremy	Toulouse	LCC	P11
Digianantonio	Lucas	Toulouse	LPCNO	P34
Drouet	Michel	Chasseneuil	Institut Pprime, CNRS UPR3346	P7
Engelmann	Yannick	Toulouse	LAPLACE	P45
Fau	Pierre	Toulouse	LCC-CNRS	P11
Felici	Roberto	Grenoble	ESRF	P43
Fontaine	Chantal	Toulouse	LAAS-CNRS	
Fu	Xiaoxiao	Toulouse	CEMES-CNRS	
Gaigeot	Marie-Pierre	Evry	LAMBE - Universite d'Evry	O7
Galatanu	Nicoleta	Sassenage	Xenocs	
Garreau	Yves	Bourg-la-Reine	Synchrotron SOLEIL	O1, P28, P34
Gaudy	Thomas	Giscaro	Hiden Analytical Limited	
Glaria	Arnaud	Toulouse	INSA Toulouse	P11, P12

Gourdon	Andre	Toulouse	CEMES-CNRS	
Grenet	Genevieve	Ecully	INL-UMR 5270	P14, P17
Guesmi	Hazar	Montpellier	Institut Charles Gerhardt	O6
Hambardzumyan	Arayik	Orleans	CNRS/CRMD	P41
Harmel	Justine	Toulouse	LPCNO	
Junay	Alexandra	Rennes	IPR CNRS	P24
Khemliche	Hocine	Orsay	ISMO - CNRS/Université Paris-Sud	O14
Khomenkova	Larysa	Toulouse	CEMES-CNRS	P40
Lacaze	Emmanuelle	Paris	UPMC	P44
Lacroix	Lise-Marie	Toulouse	INSA Toulouse	P35
Lagoute	Jerome	Paris	Moreau	P26, P42
Laporte	Sara	Paris	IMPMC	P29
Lebon Tailhades	Emilie	Toulouse	LCC-CNRS	
Leroy	Frédéric	Marseille	CINaM-CNRS	O4, P4
Maradj	Hichem	Marseille	CINaM-CNRS	P38
Marchal	Jerome	Grenoble	VAT	
Martias	Celine	Limoges	ENSCI	P27
Martinko	Ines	Toulouse	LAPLACE	P45
Meunier	Benjamin	Ecully	INL	P14
Meyer	Michael	Berlin	SPECS Surface Nano Analysis GmbH	
Michel	Anny	Chasseneuil	Institut Pprime D1	P2
Mikolasek	Mirko	Toulouse	LCC-CNRS	P15
Morillo	Joseph	Toulouse	CEMES-CNRS	
Müller	Pierre	Marseille	CINaM/cnrs	O4, P4
Nguyen	Van Bac	Toulouse	CEMES-CNRS	
Ondarçuhu	Thierry	Toulouse	CEMES-CNRS	O8
Ozanam	François	Palaiseau	LPMC	O15
Pechou	Renaud	Toulouse	CEMES-CNRS	
Penuelas	Jose	Ecully	INL	P14, P17
Peres	Laurent	Toulouse	LPCNO	
Pierucci	Debora	Marcoussis	LPN-CNRS	
Piquemal	Jean-Yves	Paris	ITODYS	O5
Plissard	Sébastien	Toulouse	LAAS-CNRS	O16
Ponchet	Anne	Toulouse	CEMES-CNRS	O9, P16
Ramos	Benjamin	Toulouse	ADPA	
Ravier	Nicolas	Croissy sur Seine	JEOL (Europe)SAS	
Raynaud	Patrice	Toulouse	LAPLACE	P45
Renaud	Gilles	Grenoble	CEA Grenoble INAC SP2M NRS	P32
Repain	Vincent	Paris	Laboratoire MPQ	P26, P42
Rochet	François	Paris	LCPMR	O10
Rohart	Stanislas	Orsay	LPS	O2
Rougemaille	Nicolas	Grenoble	Institut Neel	P18, P19, P20, P21, P43
Scheurer	Fabrice	Strasbourg	CNRS, IPCMS	
Schull	Guillaume	Strasbourg	CNRS – IPCMS	O12

Snoeck	Etienne	Toulouse	CEMES-CNRS	
Sonnet	Philippe	Mulhouse	IS2M	P8, P9, P10
Soulantika	Katerina	Toulouse	LPCNO	
Tang	Hao	Toulouse	CEMES-CNRS	P16
Tarrat	Nathalie	Toulouse	CEMES-CNRS	P3
Thune	Elsa	Limoges	SPCTS UMR 7315	P25, P27
Tricard	Simon	Toulouse	LPCNO	P22
Vallet	Maxime	Toulouse	CEMES-CNRS	P16
Vannieuwenhuyse	Jean-Marcel	Nanterre	VINCI TECHNOLOGIES	
Viau	Guillaume	Toulouse	LPCNO	P34, P35
Viguiet	Claude	Saint-Cannat	OMICRON NANOTECHNOLOGY	
Warot-Fonrose	Bénédicte	Toulouse	CEMES-CNRS	O9, P16