

Synthèse et étude des propriétés structurales et physiques des Nanocristaux par co-implantation ionique

Graine Radouane

Soutenue en: 2016

Abstract: L'implantation ionique a connu un grand essor ces dernières années dans la technologie des semi-conducteurs pour la formation des nanoparticules à des profondeurs contrôlées. Pour le synthétiser, le nitrure d'indium est implanté sur deux substrats : le silicium (Si) et le dioxyde de silicium (SiO₂). L'implantation de l'indium et de l'azote a été réalisée sur le substrat de silicium <111> avec des énergies (13,35 keV) pour N et (10, 46, 180) KeV pour In et une dose moyenne de 4.30×10^{16} at./cm². L'autre implantation a été sur le dioxyde de silicium d'une épaisseur de 260 nm. Les énergies d'implantations sont (23, 63, 180KeV) pour In et (12,28 keV) N avec une dose moyenne de 5.20×10^{16} at./cm². Les énergies ont été choisies pour atteindre une concentration atomique de 5 à 10% à une profondeur moyenne d'environ 100 nm. Nous avons effectué des traitements thermiques sur ces derniers à 500°C suivis par un recuit complémentaire à 900°C avec la croissance du temps de recuit allant de 10 min à 9h sous un flux d'azote. Ces traitements servent à guérir les défauts de structure pour différents temps de recuit. Les analyses RBS montrent un réarrangement des atomes d'indium dans les deux matrices (Si et SiO₂) à des profondeurs bien déterminées. Les échantillons ont été caractérisés par des analyses morphologique (AFM et MEB), structurales par (RBS, DRX, TEM) et optiques (Spectroscopie Raman, Spectrophotométrie UVVisible et Photoluminescence). La caractérisation structurale des nanoparticules InN dans le SiO₂ confirme la formation d'InN stœchiométrique dans la phase Hexagonale, la taille de nanoparticule entre 10 -18 nm. Les mesures de photoluminescence par laser, à température ambiante, montrent un déplacement du spectre vers les grandes longueurs d'onde (décalage vers le rouge de 620 nm à 696 nm) avec la l'augmentation du temps de recuit. Dans la seconde partie de ce travail, nous avons utilisé les résultats expérimentaux comme paramètres d'entrée pour une méthode ab-initio, en l'occurrence la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) afin d'étudier les propriétés structurales, électroniques et optiques de l'InN. Dans ce cadre, la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT), avec les approximations du gradient généralisé (GGA) et de la densité locale (LDA), a été utilisée. Les paramètres d'équilibre ont été déterminés à savoir : le paramètre du réseau, le module de compressibilité et sa dérivée. Nos résultats sont en parfaite concordance avec les travaux disponibles dans la littérature. L'investigation des propriétés électroniques a montré l'existence d'un gap direct suivant la direction de haute symétrie ???. Dans la partie optique, plusieurs grandeurs ont été étudiées, notamment la fonction diélectrique où on a pu, à partir de sa partie imaginaire, déceler les différentes transitions inter-bandes.

Keywords : FP-LAPW, densité locale (LDA)