



*33<sup>eme</sup> Edition*

# ***JOURNEES SURFACES***

## ***ET***

# ***INTERFACES***

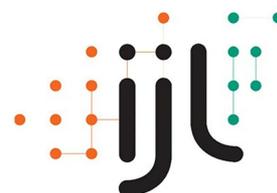
**Nancy IJL campus ARTEM - Amphi. 100 et 200**

**2 Allée A. Guinier - NANCY**

**23 – 25 Janvier 2019**

**<https://jsi2019.sciencesconf.org/>**

## Liste des partenaires et sponsors



## **Comité scientifique**

Pascal ANDREAZZA - ICMN, Orléans

Hervé BULOUE - IPCMS, Strasbourg

Nicolas COMBE - CEMES Toulouse

Geneviève GRENET - INL-ECL, Ecully

Sophie GUEZO - IPR, Rennes

Bertrand KIERREN - IJL, Nancy

Emmanuelle LACAZE - INSP, Paris

Jérôme LAGOUE - MPQ, Paris

Frédéric LEROY - CINaM, Marseille

Nicolas ROUGEMAILLE - Institut Néel, Grenoble

Philippe SONNET - IS2M, Mulhouse

## **Comité local d'organisation**

Stéphane ANDRIEU

Caroline BARJON

Yannick FAGOT-REVURAT

Vincent FOURNEE

Isabelle FOURNELLE

Emilie GAUDRY

Bertrand KIERREN

Anne-Sophie LATREILLE

Julian LEDIEU

Valérie MADELINE

Jean-François PIERSON

Hervé RINNERT

Muriel SICOT

Jean Pierre MESSE

Nicolas PAGEL

## Programme des JSI 2019 – NANCY 23 – 25 janvier

### Mercredi 23 Janvier 2019

Heure	Evènement
11:45 - 13:45	<b>Accueil et buffet de bienvenue : Institut Jean Lamour - Nancy</b>
13:45 - 14:00	<b>Ouverture – Amphi 100 - galerie ARTEM</b>
14:00 - 14:45	<b>Julian Ledieu</b> (IJL - Nancy) : Alliages métalliques complexes comme alliages de surfaces : étude du système binaire Al-Ir.
14:45 - 15:30	<b>Christine Goyhenex</b> (IPCMS - Strasbourg) : des calculs ab-initio aux modélisations atomistiques de nano particules et nano alliages.
15:30 - 16:00	<b>Pause café – Mezzanine hall IJL</b>
16:00 - 16:45	<b>Adèle Carado</b> (IPCMS - Strasbourg) : Functional Thin Films and Coatings for Biomaterial Applications: Challenges and Opportunities.
16:45 - 17:30	<b>Christophe Sinturel</b> (ICMN - Nantes) : Block copolymer thin films for nanopatterning applications.
17:30 - 18:15	<b>Arnaud Saint Jalmes</b> (IPR - Rennes) : Bulles, gouttes, mousses et émulsions : des interfaces liquides aux matériaux stimulables.

### Jeudi 24 Janvier 2019 - matin

Heure	Evènement
09:00 - 09:45	<b>Rémi Lazzari</b> (INSP - Paris) : Le mouillage aux interfaces métal/oxyde : de la question industrielle à l'étude fondamentale.
09:45 - 10:30	<b>Adrien Carretero</b> (IES - Montpellier) : Soft chemistry assisted nanostructured functional oxides on Si integrated systems.
10:30 - 11:00	<b>Pause café – Mezzanine hall IJL</b>
11:00 - 11:45	<b>Debora Pieruci</b> (ALBA - Barcelone) : 2D materials beyond graphene: synthesis, properties and applications from the single layer toward the heterostructure
11:45 - 12:30	<b>Vincent Mauchamp</b> (Institut P' - Poitier) : Les MXènes : une large famille de matériaux 2D: De la fonctionnalisation aux propriétés.
12:30 - 14:00	<b>REPAS</b>

## Jeudi 24 Janvier 2019 - après midi

Heure	Evènement
14:00 - 14:45	<b>Muriel Sicot</b> (IJL - Nancy) : Effet Kondo au sein d'auto assemblages moléculaires étudié par spectroscopie à effet tunnel.
14:45 - 15:30	<b>Sébastien Gauthier</b> (CEMES - Toulouse) : Etude par STM et nc-AFM de molécules individuelles adsorbées sur films minces isolants: Influence de l'épaisseur du film, du régime tunnel au régime isolant.
15:30 - 16:15	<b>Christian Lopacher</b> (IM2NP - Marseille) : Controlling the Self-Assembly and Polymerization of Organic Molecules on Alkali Halide Surfaces.
16:15 - 18:30	<b>Session posters – Mezzanine hall IJL</b>
20:00 - ...	<b>DINER DE GALA : Grand café Foy - Place Stanislas</b>

## Vendredi 25 Janvier 2019

Heure	Evènement
09:00 - 09:45	<b>Hélène Bea</b> (SPINTEC - Grenoble) : Large voltage tuning of Dzyalonskii-Moriya Interaction: a route towards dynamic control of skyrmion chirality.
09:45 - 10:30	<b>Marie Ingrid Richard</b> (IM2NP - Marseille) : imagerie cohérente en condition de Bragg in situ et operando de nano particules.
10:30 - 11:00	<b>Pause café – Mezanine hall IJL</b>
11:00 - 11:45	<b>Eric le Moal</b> (ISMO - Orsay) : De la nano-optique sous la pointe d'un STM.
11:45 - 12:30	<b>Fabien Chenis</b> (CINAM - Marseille) : Mécanismes de croissance et transfert de charges à l'échelle mésoscopique par microscopie à électrons lents.
12:30 - 14:00	<b>REPAS</b>

## Liste des contributions invitées

O1	<b>Hélène Bea</b> (SPINTEC - Grenoble) : Large voltage tuning of Dzyalonshtinskii-Moriya Interaction: a route towards dynamic control of skyrmion chirality.
O2	<b>Adèle Carado</b> (IPCMS - Strasbourg) : Functional Thin Films and Coatings for Biomaterial Applications: Challenges and Opportunities.
O3	<b>Adrien Carretero</b> (IES - Montpellier) : Soft chemistry assisted nanostructured functional oxides on Si integrated systems.
O4	<b>Fabien Chenis</b> (CINAM - Marseille) : Mécanismes de croissance et transfert de charges à l'échelle mésoscopique par microscopie à électrons lents.
O5	<b>Sébastien Gauthier</b> (CEMES - Toulouse) : Etude par STM et nc-AFM de molécules individuelles adsorbées sur films minces isolants: Influence de l'épaisseur du film, du régime tunnel au régime isolant.
O6	<b>Christine Goyhenex</b> (IPCMS - Strasbourg) : des calculs ab-initio aux modélisations atomistiques de nano particules et nano alliages.
O7	<b>Rémi Lazzari</b> (INSP - Paris) : Le mouillage aux interfaces métal/oxyde : de la question industrielle à l'étude fondamentale.
O8	<b>Julian Ledieu</b> (IJL - Nancy) : Alliages métalliques complexes comme alliages de surfaces : étude du système binaire Al-Ir.
O9	<b>Eric le Moal</b> (ISMO - Orsay) : De la nano-optique sous la pointe d'un STM.
O10	<b>Christian Lopacher</b> (IM2NP - Marseille) : Controlling the Self-Assembly and Polymerization of Organic Molecules on Alkali Halide Surfaces.
O11	<b>Vincent Mauchamp</b> (Institut P' - Poitiers) : Les MXènes : une large famille de matériaux 2D: De la fonctionnalisation aux propriétés.
O12	<b>Debora Pieruci</b> (ALBA - Barcelone) : 2D materials beyond graphene: synthesis, properties and applications from the single layer toward the heterostructure

**O13** **Marie Ingrid Richard** (IM2NP - Marseille) : imagerie cohérente en condition de Bragg in situ et operando de nano particules.

**O14** **Arnaud Saint Jalmes** (IPR - Rennes) : Bulles, gouttes, mousses et émulsions : des interfaces liquides aux matériaux stimulables.

**O15** **Muriel Sicot** (IJL - Nancy) : Effet Kondo au sein d'auto assemblages moléculaires étudié par spectroscopie à effet tunnel.

**O16** **Christophe Sinturel** (ICMN - Nantes) : Block copolymer thin films for nanopatterning applications.

## POSTERS

P01	Simulations numériques d'une molécule de ZnPc sur feuillet de graphène pour la photothérapie dynamique - <b>Ph. Sonnet</b>
P02	Structure and dynamics of silver atoms and nanoparticles on a substrate <b>J. Puibasset</b>
P03	Nature of surface and solvent effects on chain conformations in interfaces of polymers grafted on silica. Study by nmr technique - <b>T. Tajouri</b>
P04	XPS, XPD, RHEED and LEED investigations of 2D Si layer epitaxied on LaAlO <sub>3</sub> (111) substrate. - <b>C. Ben Azzouz</b>
P05	GeTe growth on Si(111) - <b>B. Croes</b>
P06	Room temperature ferromagnetism in two-dimensional materials - <b>A Purbawati</b>
P07	Electronic characterization of functional oxides using advanced photoemission spectroscopy techniques - <b>C. Ruano</b>
P08	Charge and spin transport in GaAs nanowires grown by HVPE - <b>H. Hijazi</b>
P09	Towards two-dimensional molecular crystals - <b>A. C. Gomez-Herrero</b>
P10	The LOREA ARPES beamline at the ALBA synchrotron - <b>D. Pierucci</b>
P11	Contrôle de la phase cristalline de nanofils de GaAs auto-catalysés - <b>T. Dursap</b>
P12	Smectic Liquid Crystal/ Gold nanoparticles composites - <b>H. Jeridi</b>
P13	Structure et croissance de germanène sur Al(111) - <b>K. Zhang</b>
P14	Epitaxial Co <sub>2</sub> Mn-based Heusler alloys for spintronics : Half Metal Magnet investigation - <b>C. Guillemard</b>
P15	Plastic relaxation of MgO epitaxially grown on BCC Fe <sub>1-x</sub> V <sub>x</sub> (001) alloys analyzed by electron diffraction - <b>S. Andrieu</b>
P16	Self-organized homo-epitaxial growth of (100) Vanadium assisted by Oxygen surface reconstruction - <b>S. Andrieu</b>
P17	Dispositif de commutation ON/OFF bidimensionnel basé sur les interactions anisotropes de boîtes quantiques sur Si(100):H - <b>Ph. Sonnet</b>
P18	Structure de bandes d'une monocouche de silicatène sur Ru(0001) - <b>T. Pierron</b>
P19	Molecular Thin Films templated on Quasicrystalline Surfaces - <b>V. fournée</b>
P20	Temperature and size-dependent atomic ordering in AgPt supported nanoparticles - <b>P. Andrezza</b>

P21	Low index surfaces of the Ba <sub>8</sub> Au <sub>5.25</sub> Ge <sub>40.75</sub> cage compound: nanostructuring and surface electronic structures - <b>E. Gaudry</b>
P22	Co/Ni multilayers for spintronics: high spin-polarization and tunable magnetic anisotropy - <b>S. Andrieu</b>
P23	Structure and reactivity of Al <sub>5</sub> Co <sub>2</sub> (2-10): combination of surface diffraction and DFT calculations - <b>C. Chatelier</b>
P24	Propagation of a nanosecond pulsed discharge in ambient air at atmospheric pressure along thin film and nanostructured surface - <b>D. Babonneau</b>
P25	Croissance Vapeur-Liquide-Solide des Nanofils GaAs : Rôle de l'interface Ga / SiO <sub>2</sub> - <b>G. Grenet</b>
P26	Formation de nanocristaux de SiP <sub>2</sub> dans des films minces d'oxydes de silicium SiO <sub>1.5</sub> riches en phosphore - <b>M. Stoffel</b>
P27	Propriétés optiques de surfaces de silicium cristallin fonctionnalisées par des terres rares - <b>K. Toussaint</b>
P28	Étude de la surface (100) de l'alliage métallique complexe Ce <sub>3</sub> Pd <sub>20</sub> Si <sub>6</sub> . F. Abdel-hamid
P29	Toward optimum N <sub>2</sub> plasma nitriding processes for GaAs(100) surface passivation - <b>C. Robert-Goumet</b>
P30	Liquid Pb droplets probing intrinsic wetting properties of Al(111) and low index surfaces of Al-based complex intermetallics - <b>K. Anand</b>
P31	Imaging and probing local energy band alignments of organic/inorganic interfaces by Ballistic Electron Emission Microscopy (BEEM) - <b>S. Guézo</b>
P32	Etude de l'adsorption de la molécule organique TBB (1, 3, 5-tri (4-bromophényle benzène)) sur la surface Si(111)-√3×√3- R30°B - <b>N. Shaik</b>
P33	Tailoring Electronic Properties In Long Range Ordered on Surface Synthetized Polymer - <b>Y. Fagot-Revurat</b>
P34	Electronic interaction between organic molecules and nitrogen doped graphene - <b>J. Lagoutte</b>

**Résumés des contributions orales et posters**

## Large voltage tuning of Dzyaloshinskii-Moriya Interaction: a route towards dynamic control of skyrmion chirality.

T. Srivastava, M. Schott, R. Juge, V. Křížáková, M. Belmeguenai, Y. Roussigné, A. Bernard-Mantel, L. Ranno, S. Pizzini, S.M. Chérif, A. Stashkevich, S. Auffret, O. Boulle, G. Gaudin, M. Chshiev, C. Baraduc, and H. Béa

<sup>1</sup>Spintec, Univ. Grenoble Alpes, CEA, CNRS, Grenoble INP, Grenoble, France

<sup>2</sup>Institut Néel, Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble, France

<sup>3</sup>Laboratoire des Sciences des Procédés et des Matériaux, Univ. Paris 13 Nord, Villetaneuse, France

Email: [helene.bea@cea.fr](mailto:helene.bea@cea.fr), web site: <http://www.spintec.fr>

Electric control of magnetism is a prerequisite for efficient and low power spintronic devices. More specifically, in heavy metal/ferromagnet/insulator (HM/FM/I) heterostructures, voltage gating has been shown to locally and dynamically tune magnetic properties like interface anisotropy and saturation magnetization [1,2]. A recent breakthrough concerning magnetic nano-objects called skyrmions, which are promising to code information bits, has attracted a specific interest on the interfacial interaction responsible for their existence, namely Dzyaloshinskii-Moriya Interaction (DMI) [3,4]. This interaction gives rise to non-collinear magnetic alignments; thus in HM/FM/I structures, magnetic bubbles are observed with Néel type domain wall of a specific chirality, determined by the sign of DMI.

The effect of electric field on DMI has been challenging to achieve and therefore has not been reported yet for ultrathin films. Here, we demonstrate 130% variation of DMI with electric field in Ta/FeCoB/TaOx trilayers through Brillouin Light Spectroscopy (BLS). We further show a monotonic variation of DMI and skyrmionic bubble size with electric field by polar-Magneto-Optical-Kerr-Effect (pMOKE) microscopy. Our experiments show an unprecedented electric field efficiency for DMI [5]:  $\beta_{\text{DMI}}=700$  fJ/Vm. The efficient DMI manipulation with voltage thus establishes an additional degree of control over skyrmions and spin-orbitronic based devices. We anticipate through our observations that a sign reversal of DMI with electric field is possible, leading to a chirality switch. This dynamic engineering of DMI sets the foundation towards programmable skyrmion based memory or logic devices.

### References

1. E. Y. Tsymbal, *Nat. Mater.* **11**, 12-13 (2012)
2. F. Matsukura, Y. Tokura and H. Ohno, *Nat. Nanotech.* **10**, 209-2020 (2015)
3. U.K. Rossler, A.N. Bogdanov and C. Pfleiderer, *Nature* **442**, 797 (2006)
4. N. Nagaosa and Y. Tokura, *Nature Nanotech.* **8**, 899-911 (2013)
5. T. Srivastava et al., *Nanolett.*, **18**, 4871 (2018)

## **Functional Thin Films and Coatings for Biomaterial Applications: Challenges and Opportunities**

*Adele Carradò<sup>1</sup>*

*<sup>1</sup> Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg, Université de Strasbourg,  
CNRS UMR 7504  
23 rue du Loess, BP 43, F-67034 Strasbourg Cedex 2, France*

*Email : [adele.carrado@ipcms.unistra.fr](mailto:adele.carrado@ipcms.unistra.fr)*

Next generation surface modification techniques for titanium implants must exhibit excellent mechanical properties while also encouraging rapid osseointegration. Despite extensive research conducted in this area, up to now there is no implant available capable of resisting bone resorption while providing implant stability.

Physical (e.g. Pulsed Laser Deposition and Magnetron sputtering) and chemical (e.g. Sol-gel and Dip-coating) processes are solid-state deposition methods used to deposit dense metal coatings and have the potential for biomedical surface coatings.

This talk reports on the relationship between processing, microstructure characterization, and biological performance of biocompatible thin films (e.g. calcium phosphates, alumina, Poly(methyl methacrylate), etc.) on titanium implants. These combinations are proposed as a solution for linking the mechanical properties of the metallic material with the bioactive and biocompatible character of the ceramic and polymeric layers, leading to a better integration of the entire implant system with the newly remodelled bone.

## Soft chemistry assisted nanostructured functional oxides on Si integrated systems

Adrian Carretero-Genevrier

1

<sup>1</sup> *Institut d'Électronique et des Systèmes (IES) UMR 5214, Bâtiment 5, 860 rue Saint Priest,  
34090 Montpellier, France*

*Email : carretero@ies.univ-montp2.fr*

The ability to combine standard wafer-scale semiconductor processing with the excellent properties of functional oxides opens the possibility to realize innovative and more efficient devices with high value applications that can be produced at large scale. However, the precise control of interfaces and crystallization mechanisms of dissimilar materials rest extremely challenging. As an example, the integration of high quality epitaxial oxide nanostructured thin films on silicon need to be further developed.

In this regard, I will present successful strategies developed at the Institut d'Electronique et des Systemes (IES) that integrate functional oxides nanostructures on silicon via chemical solution deposition (CSD) approach. Divers examples will be presented separated in two different approaches i.e: (i) perovskite oxides with enhanced physical properties performed by combining soft chemistry and molecular beam epitaxy techniques, such as epitaxial nanostructured BiFeO<sub>3</sub>, BaTiO<sub>3</sub> or La<sub>0.7</sub>Sr<sub>0.3</sub>MnO<sub>3</sub> thin films on silicon [1,2], and (ii) oxide nanomaterials entirely performed by the combination of soft chemistry and top down lithographic techniques, such as nanostructured piezoelectric quartz thin films on silicon [3] or ferroelectric oxide nanowires thin films epitaxially grown on silicon [4]. The methodologies presented here exhibit a great potential and offers a pathway to design novel oxide compounds on silicon substrates by chemical routes with unique optical, electric, or magnetic properties.

[1] Electric and Mechanical Switching of Ferroelectric and Resistive States in Semiconducting BaTiO<sub>3</sub>-<sub>8</sub>Films on Silicon. A. Gómez, J. *et al. Small*, 1701614 (2017)

[2] Integration of functional complex oxide nanomaterials on silicon. J. Vila-Fungueiriño *et al. Frontiers in Physics* 3, 38 (2015)

[3] Soft chemistry based routes to epitaxial  $\alpha$ -quartz thin films with tunables textures. A.Carretero-Genevrier *et al. Science. Vol 340. Pp 827-831* (2013)

[4] Direct Monolithic Integration of Vertical Single Crystalline Octahedral Molecular Sieve Nanowires on Silicon. A. Carretero-Genevrier *et al. Chemistry of Materials* 26 1019 (2014)

## Mécanismes de croissance et transfert de charges à l'échelle mésoscopique par microscopie à électrons lents

**Fabien Cheynis, Stefano Curiotto, Frédéric Leroy, Pierre Müller**

*Aix Marseille Univ, CNRS, CINAM, Marseille, France*

*E-mail: [cheynis@cinam.univ-mrs.fr](mailto:cheynis@cinam.univ-mrs.fr)*

Les méthodes de caractérisation *in situ* sont des outils de prédilection pour la compréhension et la maîtrise de la croissance et des propriétés des nanomatériaux. La microscopie à électrons lents (low-energy electron microscopy, LEEM) permet notamment la caractérisation morphologique en temps réel et *in situ* de surfaces cristallines, à l'échelle mésoscopique. Les développements récents de cette microscopie ont démontré qu'il était également possible de suivre, en cours de croissance, la concentration d'une espèce atomique ou moléculaire déposée sur une surface [1-3]. Ceci permet notamment une analyse quantitative de phénomènes atomiques tels que la nucléation d'une phase condensée (îlots 2D et/ou 3D), la diffusion de surface ...

Par ailleurs, cette technique, utilisant un faisceau électronique de faible énergie, est sensible aux variations locales du travail de sortie et permet donc la caractérisation de transferts de charges entre un dépôt et un substrat. De récentes études ont démontré l'intérêt de cette fonctionnalité et la variété des domaines d'applications [4-6].

Après une revue d'exemples tirés de la littérature, nous nous intéresserons à un gaz électronique 2D induit par transfert de charges entre un gaz atomique et un état électronique de la surface Si(111) reconstruite ( $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ )-R30° par un dépôt d'Ag. Nous montrerons notamment qu'en dessous de la température ambiante, le gaz électronique reproduit les inhomogénéités spatiales et variations temporelles du gaz atomique dont il résulte. Le confinement des gaz électronique et atomique à l'échelle des terrasses atomiques trouve pour partie son origine dans l'apparition à basses températures d'une barrière de diffusion atomique de type Ehrlich-Schwoebel de  $155\pm 10$ meV [7].

### **Bibliographie**

- [1] J. de la Figuera et al., Surf. Sci. **600** (2006) 4062.
- [2] E. Loginova et al., New J. Phys. **11** (2009) 063046.
- [3] D. Schwarz et al., Phys. Rev. B **85** (2012) 235419.
- [4] Y. Murata et al. Phys. Rev. B **85** (2012) 205443.
- [5] J. E. Rault et al. Phys. Rev. Lett. **109** (2012) 267601.
- [6] X. Jin et al. J. Appl. Phys. **116** (2014) 174509.
- [7] F. Cheynis et al., Sci. Rep. **7** (2017) 10642.

## **Etude par STM et nc-AFM de molécules individuelles adsorbées sur films minces isolants: Influence de l'épaisseur du film, du régime tunnel au régime isolant**

T. Ardhuin, O. Guillermet, \*S. Gauthier

*CEMES CNRS UPR 8011 and Université de Toulouse, 29 rue Jeanne Marvig, 31055  
Toulouse, France*

*\*e-mail: gauthier@cemes.fr*

La microscopie à effet tunnel (STM) permet de visualiser dans l'espace direct la distribution électronique associée aux orbitales moléculaires d'une molécule adsorbée, en particulier lorsque celle-ci est découplée de son support métallique par un film mince isolant [1,2]. La microscopie à force atomique (AFM) permet quant à elle de remonter à la structure atomique de la molécule grâce à l'utilisation de pointes fonctionnalisées [3]. Cette complémentarité entre les deux techniques est largement utilisée pour explorer les relations entre structure et structure électronique. Mais elle est limitée aux substrats conducteurs (métaux, films minces isolants sur métaux). L'AFM, qui s'affranchit de cette restriction, peut néanmoins fournir des informations sur la structure électronique par sa capacité à mesurer les forces électrostatiques. La méthode consiste à faire varier la charge du système tout en suivant les variations concomitantes de la force électrostatique qui s'exerce entre la pointe et le système. Elle a été appliquée à des boîtes quantiques [4], des atomes [5] et des molécules individuelles [6] ainsi qu'à des lacunes de Cl à la surface d'un film mince de NaCl [7].

Nous montrerons dans quelles conditions et selon quels mécanismes la charge d'une molécule individuelle adsorbée sur un film mince isolant peut être contrôlée et mesurée à partir de nos propres expériences [6,8] et de travaux issus de la littérature en insistant plus particulièrement sur le rôle joué par l'épaisseur du film.

- [1] J. Repp et al, PRL **94**, 026803 (2005)
- [2] C. Villagomez et al, Chemical Physics Letters **450**, 107 (2007)
- [3] L. Gross et al, Science **325**, 1110 (2009)
- [4] Y. Miyahara et al Nanotechnology **28**, 064001 (2017)
- [5] L. Gross et al, Science **324**, 1428 (2009)
- [6] T. Léoni et al, PRL. **106**, 216103 (2011)
- [7] W. Steurer et al, Surface Science **678**, 112 (2018)
- [8] T. Ardhuin, thèse Université de Toulouse 3 Paul Sabatier (2018)

## **Des calculs ab initio aux modélisations atomistiques de nanoparticules et nanoalliages**

Christine Goyhenex<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg, Université de Strasbourg,  
CNRS UMR 7504  
23 rue du Loess, BP 43, F-67034 Strasbourg Cedex 2, France*

*Email : christine.goyhenex@ipcms.unistra.fr*

Les nanoparticules et les nanoalliages font l'objet de très nombreuses études en raison de leurs remarquables propriétés dans des domaines aussi variés que la catalyse, le magnétisme, l'optique et la santé. Ils reçoivent une attention grandissante en raison de leur possibilité de répondre à des enjeux économiques et sociétaux aussi importants que les traitements du cancer, la mise en œuvre de dispositifs énergétiques pour un développement durable, la dépollution, le stockage massif des données, etc. Dans ce contexte, un défi scientifique important est de modéliser conjointement la structure et les propriétés de base de ces objets, aussi précisément que possible, en vue de participer au design de nouveaux matériaux pour des applications bien ciblées. En particulier, la modélisation de (nano)matériaux réalistes nécessite généralement des approches à différentes échelles spatio-temporelles, impliquant d'aller des calculs de premiers principes à des modèles phénoménologiques en passant par les simulations atomistiques. Dans cette conférence, un état de l'art dans le domaine de la modélisation des nanoparticules et des nanoalliages sera donc présenté en premier lieu. La complémentarité des études à différentes échelles spatio-temporelles sera ensuite illustrée par la présentation d'études associant des calculs de DFT (Density Functional Theory) et des simulations atomistiques de nanoparticules métalliques et de nanoalliages magnétiques et/ou catalytiques. Une attention particulière sera portée aux perspectives d'améliorer les modèles énergétiques usuels pour traiter, dans une approche simplifiée mais flexible, basée sur le formalisme des liaisons fortes, les interactions dépendant de la polarisation en spin et les liaisons métal-hydrogène impliquées dans le domaine de la catalyse.

## **Le mouillage aux interfaces métal/oxyde : de la question industrielle à l'étude fondamentale**

Rémi Lazzari,<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Institut des NanoSciences de Paris, CNRS/Sorbonne Université, Campus Jussieu – Tours 22 et 23 – Case courrier 840  
4 place Jussieu – 75252 Paris Cedex 5 – France*

*Email : remi.lazzari@insp.jussieu.fr*

En se basant sur les deux exemples des vitrages bas-émissifs à l'argent et de la galvanisation des aciers alliés, l'exposé s'attachera à montrer comment des problèmes industriels complexes de mouillage métal/oxyde peuvent conduire à des questionnements fondamentaux. A ces interfaces, adhésion, (dé)mouillage, forme d'équilibre, contraintes, épitaxie, transfert de charge, alignement de bandes, chimie d'interface, mode de croissance, rôle des défauts sont des questions qui se font écho et dont la compréhension requiert une approche globale des systèmes étudiés.

La stratégie développée au sein de l'équipe « Oxydes en Basses Dimensions » de l'INSP est fondée sur un couplage étroit entre simulations numériques (*ab initio* et dynamique moléculaire) et expériences depuis les premiers stades de croissance des interfaces jusqu'à la formation de films percolés et leur démouillage. L'approche expérimentale du groupe repose sur une combinaison assez peu mise en pratique en science des surfaces : plasmonique pour l'étude des modes de croissance et du mouillage, détermination structurale par EXAFS et analyse de surface (photoémission, TPD, microscopie champ proche).

Plus spécifiquement, l'exposé se focalisera sur les voies d'amélioration du mouillage du Zn/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, le rôle relatif des contraintes de surface et d'interface dans les particules d'Ag supportées, la dynamique de démouillage des films d'Ag et l'alignement de bandes à l'interface Ag/ZnO.

## De la nano-optique sous la pointe du STM

Eric LE MOAL<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay,  
Bât.520 - Rue André Rivière  
91405 Orsay Cedex, France*

*Email : eric.le-moal@u-psud.fr*

Par bien des aspects, le microscope à effet tunnel (STM) est un outil incomparable. Il permet une spectroscopie électronique et une imagerie de surface résolue spatialement à l'échelle atomique. C'est également une source d'excitation optique dont la sélectivité spatiale va bien au-delà de la limite de diffraction de la lumière. En effet, le courant tunnel entre la pointe du STM et la surface de l'échantillon peut générer très localement des excitons ou des polaritons de plasmon de surface, par transfert d'énergie non-radiatif (souvent nommé effet tunnel inélastique). Ainsi, la jonction tunnel se comporte comme une nanosource électrique de lumière. Cela ouvre de nombreuses possibilités pour la recherche fondamentale ainsi que pour le développement de nanodispositifs optoélectroniques à base de jonction tunnel. Des exemples d'applications à la plasmonique et à l'étude de semiconducteurs bidimensionnels seront présentés.

## **Alliages métalliques complexes comme alliages de surface: étude du système binaire Al-Ir.**

<sup>1</sup>J. Kadok, <sup>2</sup>K. Pussi, <sup>3,4</sup>S. Šturm, <sup>3,5,4</sup>B. Ambrožič, <sup>1,4</sup>É. Gaudry, <sup>1,4</sup>M.-C. de Weerd,  
<sup>1,4</sup>V. Fournée, and <sup>1,4,\*</sup>J. Ledieu

<sup>1</sup>*Institut Jean Lamour, UMR 7198 CNRS - Université de Lorraine, Campus Artem, 2 allée André Guinier, 54000 Nancy, France*

<sup>2</sup>*LUT School of Engineering Science, Lappeenranta University of Technology, P.O. Box 20, FIN-53851 Lappeenranta, Finland*

<sup>3</sup>*Jožef Stefan Institute, Department for Nanostructured Materials, Ljubljana, Slovenia*

<sup>4</sup>*International Associated Laboratory PACS2, CNRS and Université de Lorraine, Nancy-JSI, Ljubljana, Slovenia*

<sup>5</sup>*Jožef Stefan International Postgraduate School, Jamova cesta 39, SI-1000 Ljubljana, Slovenia*

\*e-mail: [julian.ledieu@univ-lorraine.fr](mailto:julian.ledieu@univ-lorraine.fr)

Les alliages métalliques complexes, intermétalliques composés d'au moins deux éléments, sont caractérisés par une maille contenant plusieurs dizaines voire milliers d'atomes, au sein de laquelle la sous-structure est mieux décrite par des agrégats de haute symétrie. De cette complexité structurale et chimique découlent des propriétés uniques à la fois dans le volume mais aussi à la surface de ces matériaux. Avec des coefficients de frottement faibles, une faible adhésion ou encore une bonne résistance à l'oxydation, plusieurs de ces alliages métalliques complexes ont été élaborés sous forme de films minces en vue de leur utilisation comme revêtements fonctionnels. Une autre technique consiste à former ces intermétalliques complexes par un alliage de surface de l'élément ainsi déposé avec le substrat.

Dans cette optique, nous nous concentrerons sur l'étude du système binaire Al-Ir qui suscite un intérêt à la fois d'un point de vue fondamental et applicatif. Avec un diagramme de phase sujet à débat, l'utilisation de ces matériaux est envisagée sous forme de revêtements dans des moteurs à turbine à gaz du fait de leurs propriétés combinatoires uniques. Afin d'optimiser ces revêtements, il est important de décrire et de comprendre à l'échelle atomique les structures de surface et d'interface de tels matériaux. Pour cela, une étude "modèle" a été menée où l'adsorption Ir sur une surface Al(100) a été caractérisée par une approche couplant expériences et calculs *ab initio*. Les résultats indiquent une croissance épitaxiale de Al<sub>9</sub>Ir<sub>2</sub> à la surface Al(100). Les mécanismes menant aux orientations particulières des domaines Al<sub>9</sub>Ir<sub>2</sub>(001) seront proposés ainsi que la structure et la composition des plans de surface. Enfin, des observations transversales par microscopie électronique à transmission viendront compléter les analyses de surface et permettront de caractériser l'interface *matrice Al-composé binaire*.

# Controlling the Self-Assembly and Polymerization of Organic Molecules on Alkali Halide Surfaces

Christian Loppacher<sup>1</sup>, F. Para<sup>1</sup>, F. Bocquet<sup>1</sup>, L. Nony<sup>1</sup>, M. Féron<sup>2</sup>, F. Cherioux<sup>2</sup>, D. Z. Gao<sup>3</sup>, F. Federici Canova<sup>3</sup>, and M.B. Watkins<sup>4</sup>.

<sup>1</sup> *IM2NP UMR 7334, Aix-Marseille Université, CNRS, F-13397 Marseille;*  
<sup>2</sup> *FEMTO-ST, Univ. Bourgogne Franche-Comté, CNRS, F-25030 Besançon;*  
<sup>3</sup> *Nanolayers Research Computing LTD, Sheffield, UK, S10 2NP;*  
<sup>4</sup> *School of Mathematics and Physics, University of Lincoln,*

*email\* christian.loppacher@im2np.fr*

Achieving control over the formation of molecular one dimensional (1D) and 2D structures on insulating substrates is important for designing novel functional materials and devices. In order to achieve this goal, we decided to combine, (i) atomically clean ionic substrate with different lattice constants, (ii) on-demand synthesized molecules with various functional groups, and (iii) well adapted growth conditions. In such a way we were able to control the self-assembly of large domains of defect-free organic layers [1], to understand the role of molecular flexibility and enthalpy in the nucleation and growth of these layers [2], and to initiate a novel, UV-light induced chain-polymerization of 1D fibres on a pure insulator [3, Fig. 1].

The key issue in all of these experiments is to balance the molecule-molecule and molecule-substrate interactions in such a way that the desired interactions govern the growth mode and that the (pre-) designed structures can be formed.

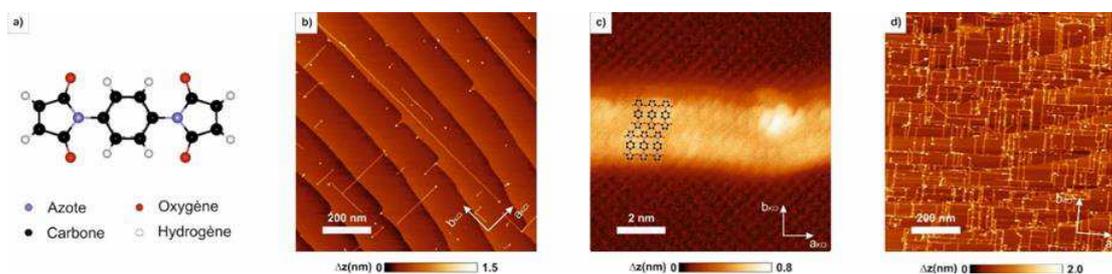


Fig. 1: Radical chain polymerization of dimaleimide molecules (a) on a KCl surface. ncAFM topography images showing (b) spontaneously polymerized fibres with up to 1  $\mu\text{m}$  in length, (c) the inner zig-zag structure of a polymer fibre and its orientation with respect to the KCl crystal axis, and (d) the increased number of fibres formed when the polymerization was assisted by UV-light illumination.

**Acknowledgements** :Financial Support from A\*Midex, the CNRS, the Region PACA, and the ANR (PhotoNet ANR-16-JTIC-0002) is gratefully acknowledged.

## Bibliography

- [1] A. Amrous *et al.*, *Adv. Mater. Interfaces* **1400414** (2014); DOI: 10.1002/admi.201400414  
 [2] J. Gaberle *et al.*, *J. Phys. Chem. C* **121**, 4393 (2017); DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b12738  
 [3] F. Para *et al.*, *Nature Chemistry* **10**, 1112 (2018); DOI: 10.1038/s41557-018-0120-x

## **Les MXènes : une large famille de matériaux 2D De la fonctionnalisation aux propriétés**

*V. Mauchamp<sup>1</sup>, T. Bilyk<sup>1</sup>, D. Magné<sup>1</sup>, S. Hurand<sup>1</sup>, M. Benchakar<sup>2</sup>,  
P. Chartier<sup>1</sup>, A. Habrioux<sup>2</sup>, T. Cabioc'h<sup>1</sup>, J. Pacaud<sup>1</sup>, et S. Célérier<sup>2</sup>.*

*1/ Institut Pprime, UPR 3346 – CNRS, Université de Poitiers, ISAE-ENSMA – SP2MI, Bd Marie &  
Pierre Curie,  
BP 30179, F86962 Futuroscope-Chasseneuil Cédex*

*2/ Institut de Chimie des Milieux et Matériaux de Poitiers (IC2MP), UMR CNRS 7285, Faculté des  
Sciences Fondamentales et Appliquées,  
Université de Poitiers, 4 rue Michel Brunet, Batiment B27,  
TSA 51106, 86073 Poitiers Cedex 9*

*\* [vincent.mauchamp@univ-poitiers.fr](mailto:vincent.mauchamp@univ-poitiers.fr)*

Les MXènes forment une classe particulièrement large de matériaux 2D (plus de 20 composés synthétisés à ce jour) constitués de feuillets de carbures ou nitrures de métaux de transition [1]. Ces matériaux, synthétisés pour la première fois en 2011 [2], sont obtenus par exfoliation chimique de céramiques nanolamellaires : les phases MAX [3]. Du fait du processus de synthèse, les MXènes sont fonctionnalisés en surface par différents groupements terminaux « T » (T = -O, -F, -OH) qui affectent significativement leurs propriétés et leur confèrent un caractère hydrophile facilitant leur mise en forme. De ce fait, ces matériaux - souvent décrits comme des argiles conductrices - trouvent des applications extrêmement prometteuses dans des domaines aussi variés que le stockage de l'énergie, le blindage électromagnétique, l'optique, la détection ou la communication sans fil. Après une présentation générale des MXènes et de leurs propriétés, nous nous focaliserons essentiellement sur l'étude de leur fonctionnalisation. Du point de vue de la caractérisation, des techniques de spectroscopie telles que la spectroscopie de perte d'énergie des électrons (EELS) couplée à des simulations numériques permettent de faire le lien entre les caractéristiques des groupements terminaux (*e.g.* nature/position) et leur rôle sur la structure électronique des feuillets [4,5]. Ce lien sera mis à profit pour étudier le rôle de la fonctionnalisation sur certaines propriétés électroniques - optiques notamment [4,6]-, discussion qui sera par la suite étendue à d'autres propriétés et au rôle clé joué par les méthodes d'exfoliation [7].

### **References**

- [1] B. Anasori *et al.*, Nature Reviews Materials vol. 2, 16098 (2017)
- [2] M. Naguib *et al.*, Advanced Materials vol. 23, 4248 (2011)
- [3] M.W. Barsoum, *MAX phases: properties of machinable carbides and nitrides*, Weinheim: Wiley-VCH GmbH (2013).
- [4] D. Magné *et al.*, Physical Review B vol. 91, 201409 (R) (2015)
- [5] D. Magné *et al.*, Physical Chemistry Chemical Physics vol. 18, 30946 (2016)
- [6] V. Mauchamp *et al.*, Physical Review B vol. 89, 235428 (2014)
- [7] X. Wang *et al.*, Journal of Materials Chemistry A vol. 5, 22012 (2017)

## 2D materials beyond graphene: synthesis, properties and applications from the single layer toward the heterostructure

*D. Pierucci<sup>1,2</sup>, J. Zribi<sup>2</sup>, H. Henck<sup>2</sup>, Z. Ben Aziza<sup>2</sup>, J. Chaste<sup>2</sup>,  
E. Lhuillier<sup>3</sup> and A. Ouerghi<sup>2</sup>*

*1 CELLS - ALBA Synchrotron Radiation Facility, Carrer de la Llum 2-26,  
08290 Cerdanyola del Valles, Barcelona, Spain*

*2 Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies, CNRS, Univ. Paris-Sud,  
Université Paris-Saclay, C2N – Marcoussis, 91460 Marcoussis, France*

*3 Institut des Nanosciences de Paris, UPMC-CNRS UMR 7588, 4 place Jussieu,  
75252 Paris cedex 05, France*

*Email : debora.pierucci@gmail.com*

In December 1959, Richard P. Feynman in his famous lecture entitled «*There`s Plenty of Room at the Bottom*», introduced the importance of layered materials and specifically proposed the isolation of individual layers. He stated “*What could we do with layered structures with just the right layer? What would the properties of materials be if we could really arrange the atoms the way we want them...*”<sup>1</sup>. We had to wait until 2004 to see this prediction attempted, when Novoseleov et al. discovered the truly novel transport properties of individual graphene sheets through mechanical exfoliation of graphite<sup>2</sup>. The isolation of graphene was a defying moment for the “birth” of a field: **two-dimensional (2D) materials**. In fact a year later, the same group demonstrated that, by using repeated mechanical exfoliation, one could isolate monolayers of other layered materials<sup>3</sup>. Interestingly, more than half a century after Feynman’s lecture, we now know that, by controlling the number of layers of these materials, engineering unprecedented physicochemical properties is possible. In addition to the isolation of individual layers, one can also stack layers of different materials on top of each other in desired orientations and thereby engineer novel heterostructures with unprecedented properties<sup>4</sup>. In this talk, I will focus the attention on the 2D family of transition metal dichalcogenides MX<sub>2</sub> (MoS<sub>2</sub> and WS<sub>2</sub>) and monochalcogenides MX (GaSe, InSe). These materials have gained world-wide attention in recent years and are being heavily researched for use in photovoltaic devices, lithium ion batteries, hydrogen evolution catalysis, transistors, photodetectors, DNA detection, and memory devices<sup>5</sup>. In particular, I will discuss the electronic properties of these materials and how 2D layers can be assembled to create van der Waals heterostructure<sup>6-12</sup>. I will also explore the case of mixed dimensional vdW heterostructure (2D/3D materials) device.

### References

- (1) There`s Plenty of Room at the Bottom. <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>.
- (2) Novoselov, K. S.; Geim, a K.; Morozov, S. V; Jiang, D.; Zhang, Y.; Dubonos, S. V; Grigorieva, I. V; Firsov, a a. *Science* **2004**, *306* (5696), 666–669.
- (3) Novoselov, K. S.; Jiang, D.; Schedin, F.; Booth, T. J.; Khotkevich, V. V; Morozov, S. V; Geim, a K. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **2005**, *102* (30), 10451–10453.
- (4) Novoselov, K. S.; Mishchenko, A.; Carvalho, A.; Castro Neto, A. H. *Science* **2016**, *353* (6298), aac9439.
- (5) Choi, W.; Choudhary, N.; Han, G. H.; Park, J.; Akinwande, D.; Lee, Y. H. *Mater. Today* **2017**, *20* (3), 116–130.

- (6) Pierucci, D.; Henck, H.; Avila, J.; Balan, A.; Naylor, C. H.; Patriarche, G.; Dappe, Y. J.; Silly, M. G.; Sirotti, F.; Johnson, A. T. C.; Asensio, M. C.; Ouerghi, A. *Nano Lett.* **2016**, *16* (7), 4054–4061.
- (7) Pierucci, D.; Henck, H.; Naylor, C. H.; Sediri, H.; Lhuillier, E.; Balan, A.; Rault, J. E.; Dappe, Y. J.; Bertran, F.; Le Fèvre, P.; Johnson, A. T. C.; Ouerghi, A.; Avila, J.; Asensio, M.; Charlie, A. T. *Sci. Rep.* **2016**, *6*, 26656.
- (8) Ben Aziza, Z.; Henck, H.; Pierucci, D.; Silly, M. G.; Lhuillier, E.; Patriarche, G.; Sirotti, F.; Eddrief, M.; Ouerghi, A. *ACS Nano* **2016**, *10*, 9679–9686.
- (9) Ben Aziza, Z.; Henck, H.; Di, D.; Pierucci, D.; Chaste, J.; Naylor, C. H.; Balan, A.; Dappe, Y. J.; Johnson, A. T. C.; Ouerghi, A. *Carbon N. Y.* **2016**, *110*, 396–403.
- (10) Henck, H.; Ben Aziza, Z.; Zill, O.; Pierucci, D.; Naylor, C. H.; Silly, M. G.; Gogneau, N.; Oehler, F.; Collin, S.; Brault, J.; Sirotti, F.; Bertran, F.; Le Fèvre, P.; Berciaud, S.; Johnson, A. T. C.; Lhuillier, E.; Rault, J. E.; Ouerghi, A. *Phys. Rev. B* **2017**, *96* (11), 115312.
- (11) Pierucci, D.; Henck, H.; Ben Aziza, Z.; Naylor, C. H.; Balan, A.; Rault, J. E.; Silly, M. G.; Dappe, Y. J.; Bertran, F.; Le Fèvre, P.; Sirotti, F.; Johnson, A. T. C.; Ouerghi, A. *ACS Nano* **2017**, *11* (2), 1755–1761.
- (12) Henck, H.; Pierucci, D.; Chaste, J.; Naylor, C. H.; Avila, J.; Balan, A.; Silly, M. G.; Asensio, M. C.; Sirotti, F.; Johnson, A. T. C.; Lhuillier, E.; Ouerghi, A. *Appl. Phys. Lett.* **2016**, *109* (11).

## Coherent diffraction for a look inside nanostructures: catalysis and interface.

M.-I. Richard<sup>a,b</sup>, J. Carnis<sup>a,b</sup>, L. Gao<sup>c</sup>, J.P. Hofmann<sup>c</sup>, S. Labat<sup>a</sup>, S. Fernandez<sup>a,b</sup>, E.J.M. Hensen<sup>c</sup>, O. Thomas<sup>a</sup>

<sup>a</sup>*Aix Marseille Université, CNRS, Université de Toulon, IM2NP UMR 7334,  
13397 Marseille, France.*

<sup>b</sup>*ID01/ESRF, 6 rue Jules Horowitz, BP220, F-38043 Grenoble Cedex, France*

<sup>c</sup>*Laboratory of Inorganic Materials Chemistry, Department of Chemical  
Engineering and Chemistry, Eindhoven University of Technology, P. O. Box 513,  
5600MB Eindhoven, The Netherlands*

*E-mail: marie-ingrid.richard@im2np.fr*

Characterising the structural properties (strain gradients, chemical composition, crystal orientation and defects) inside nanostructures is a grand challenge in materials science. Bragg coherent diffraction imaging (Bragg CDI) can be utilised to address this challenge for crystalline nanostructures. A resolution of the structural properties of less than 10 nm is achieved up-to-date [1]. The capabilities of the Bragg CDI technique will be demonstrated on single nanoparticles for enhanced catalysis.

As an example, the Bragg CDI technique allows understanding the interplay between shape, size, strain, faceting [2], composition and defects at the nanoscale. We will demonstrate that Bragg CDI on a single particle model catalyst makes it possible to map its local strain/defect field and directly images strain build-up close to the facets. The localized strain modifies sorption energies of the reactants. *In situ* [3,4] and *operando* Bragg CDI was also performed: it was possible to track a single particle in liquid and gas phase environments, to monitor its facet changes and to measure its strain response to gas or electrochemical reaction.

This technique opens pathways to determine and control the internal structure of nanoparticles to tune and optimise them during catalytic and other chemical reactions.

### Acknowledgements

Financial support to this work by ANR Charline (ANR-16-CE07-0028-01) is gratefully acknowledged.

### Bibliography

- [1] S. Labat, M.-I. Richard, M. Dupraz, M. Gailhanou, G. Beutier, M. Verdier, F. Mastropietro, T. W. Cornelius, T. U. Schüllli, J. Eymery, and O. Thomas, *ACS Nano* **9**, 9210 (2015).
- [2] M.-I. Richard, S. Fernandez, J. Eymery, J.-P. Hofmann, L. Gao, J. Carnis, S. Labat, V. Favre-Nicolin, E. J. M. Hensen, O. Thomas, T. Schüllli, and S. J. Leake, Submitted (2017).
- [3] M.-I. Richard, S. Fernández, J. P. Hofmann, L. Gao, G. A. Chahine, S. J. Leake, H. Djazouli, Y. De Bortoli, L. Petit, P. Boesecke, S. Labat, E. J. M. Hensen, O. Thomas, and T. Schüllli, *Review of Scientific Instruments* **88**, 093902 (2017).
- [4] S. Fernández, L. Gao, J. P. Hofmann, J. Carnis, S. Labat, G. A. Chahine, A. J. F. van Hoof, M. W. G. M. (Tiny) Verhoeven, T. U. Schüllli, E. J. M. Hensen, O. Thomas, and M.-I. Richard, *Nanoscale* **11**, 331 (2019).

## **Bulles, gouttes, mousses et émulsions : des interfaces liquides aux matériaux stimulables**

Arnaud Saint Jalmes<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Institut de Physique de Rennes,  
263 Avenue Général Leclerc, 35700 Rennes France*

*Email : arnaud.saint-jalmes@univ-rennes1.fr*

Une mousse liquide est une dispersion de gaz dans un fluide : le matériau obtenu est un amas de bulles de gaz compactées les unes contre les autres. De même, une émulsion est une dispersion d'un liquide dans un autre, dans laquelle la phase dispersée se trouve sous forme de gouttes, plus ou moins compactées. Ces matériaux – mousses et émulsions – ont des propriétés mécaniques, optiques, acoustiques, etc... inattendues et souvent très différentes de leurs constituants initiaux. C'est d'ailleurs pour cette diversité qu'on les retrouve dans notre vie quotidienne (cosmétiques, agroalimentaire, détergence, ...).

Je présenterai d'abord un panorama sur ce type de matériaux dispersés liquides, revenant sur les grandes thématiques de recherche : mécanismes de formation, modes de vieillissement, méthodes de caractérisation et mesures de propriétés macroscopiques.

Je montrerai surtout comment leurs propriétés dépendent aussi fortement de la formulation chimique (tensioactifs, polymères, particules...) utilisée pour les stabiliser, via les propriétés à l'échelle des interfaces liquides. Ceci me permettra d'introduire les avancées les plus récentes en physico-chimie des interfaces liquides, des mousses et des émulsions, notamment la possibilité de créer des matériaux capables de changer fortement de propriétés ou de stabilité en fonction de stimuli extérieurs (lumière, température,...).

## Effet Kondo au sein d'auto assemblages moléculaires étudié par spectroscopie tunnel

Julien Granet<sup>1</sup>, Muriel Sicot<sup>1</sup>, Simon Lamarre<sup>2</sup>, Frédéric Cherioux<sup>2</sup>, Iann Gerber<sup>3</sup>, Bertrand Kierren<sup>1</sup>, Yannick Fagot-Revurat<sup>1</sup> et Daniel Malterre<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut Jean Lamour, UMR 7198, CNRS Université de Lorraine, Campus Artem, 2 allée André Guinier, BP 50840, F-54011 Nancy, France.

<sup>2</sup> Institut FEMTO-ST, Université de Bourgogne Franche Comté, CNRS, 15B Avenue des Montboucons, F-25030 Besançon cedex, France.

<sup>3</sup> Université de Toulouse, INSA-CNRS-UPS, LPCNO, 135 Avenue de Rangueil, 31077 Toulouse, France.

Email: [muriel.sicot@univ-lorraine.fr](mailto:muriel.sicot@univ-lorraine.fr)

Des molécules adsorbées à la surface de métaux constituent des systèmes idéaux pour l'étude des phénomènes à N-corps tel que l'effet Kondo à l'échelle atomique. Par ailleurs, l'auto-assemblage moléculaire offre la possibilité de créer des réseaux de spins uni- ou bi-dimensionnels ce qui ouvre la voie à l'étude de la physique Kondo dans des systèmes à basse dimension, largement inexplorée à ce jour. Dans ce travail, nous utilisons deux types de réseaux supramoléculaires à base de porphyrines et phthalocyanines adsorbées sur des surfaces monocristallines de métaux nobles d'orientation (111) dans le but d'étudier par spectroscopie à effet tunnel, l'émergence d'un effet Kondo. Ces deux systèmes ont été spécialement choisis en fonction de l'orbitale de l'électron non apparié impliqué dans les processus à N-corps. Dans un cas, il s'agit d'une orbitale 4f localisée d'un ion de cérium pris en sandwich entre deux macrocycles et dans l'autre cas, il s'agit d'une orbitale  $\pi$  délocalisée sur le macrocycle de type phthalocyanine. Pour chaque composé moléculaire, nous avons étudié l'influence des interactions substrat-molécule et molécule-molécule sur l'occurrence de l'effet Kondo et ses caractéristiques [1]. Ce travail vise à améliorer la compréhension de l'effet Kondo moléculaire et ouvre la voie à la fabrication de dispositifs électroniques nanoscopiques.

[1] J. Granet *et al.*, *Nanoscale* 10 (2018) 9123.

## **Block copolymer thin films for nanopatterning applications**

Christophe Sinturel<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *ICMN, CNRS-Université d'Orléans, Orléans, France*

*Email : christophe.sinturel@univ-orleans.fr*

Polymers in thin films (i.e. 100 nm and below) are an exciting type of materials since they can exhibit different properties compared to the bulk, due to limited amount of matter and surface interactions. Consequently, phenomenon like glass transition, crystallization, phase separation, nanostructuration arising from self-organization of block copolymers, or even swelling in solvent vapors can be greatly affected in thin films. In this presentation, we will focus on the microphase segregation observed in thin films of block copolymers that can be used to form nanopatterns similar to the elements defined in conventional lithographic processes, allowing to go beyond the characteristic length limits imposed by more conventional devices fabrication techniques. This talk will review the elaboration, characterization and applications of block copolymer thin films. We will particularly focus the presentation on the control of the morphology of the polymeric systems by exposure to solvent vapors and exemplified some specific properties arising from the thin film configuration.

## Simulations numériques d'une molécule de ZnPc sur feuillet de graphène pour la photothérapie dynamique

F. Picaud<sup>1</sup>, E. Duverger<sup>2</sup>, L. Stauffer<sup>3,4</sup>, Ph. Sonnet<sup>3,4\*</sup>

*1 - Laboratoire de Nanomédecine, Université de Bourgogne Franche Comté (UBFC),  
25000, Besançon, France (fabien.picaud@univ-fcomte.fr).*

*2- FEMTO-ST Institute Université de Bourgogne Franche Comté (UBFC),  
F-25030 Besançon, France (eric.duverger@univ-fcomte.fr).*

*3 - IS2M, UHA, CNRS UMR 7361, F-68093 Mulhouse, France (philippe.sonnet@uha.fr).*

*4 - Université de Strasbourg, France*

\* Email : philippe.sonnet@uha.fr

Du fait de ses propriétés photophysiques spécifiques, la molécule de phthalocyanine de zinc (ZnPc) se présente comme un bon candidat en tant que photo-sensibilisateur dans le cadre de la photothérapie dynamique (PDT). Dans ce travail, nous nous proposons d'améliorer l'efficacité de la molécule de ZnPc vis-à-vis d'une membrane cellulaire, en associant cette molécule de ZnPc à un feuillet de graphène [1].

Tout d'abord, nous montrons, au moyen de simulations TD-DFT (Time-Dependent Density Functional Theory), que la molécule de ZnPc en interaction avec un feuillet de graphène préserve les propriétés optiques nécessaires à une utilisation dans le cadre de la PDT. Ces calculs sont, non seulement effectués dans le vide, mais également en présence d'un solvant (eau) dans le cadre du modèle dit PCM (polarizable continuum model).

Des simulations de dynamique moléculaire sont ensuite effectuées afin d'évaluer le processus dynamique de vectorisation de la molécule de ZnPc sur son feuillet. Ainsi, l'environnement biologique complet est pris en compte avec la simulation d'une membrane cellulaire formée de 656 molécules de 1-palmitoyl-2-oleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine lipide (noté POPC) et d'une solution saline. Les calculs démontrent que le feuillet de graphène permet de stabiliser le système ZnPc/graphène près de la membrane, ce qui n'est pas le cas lorsque la molécule est seule en présence de cette membrane.

En conclusion, nous montrons par notre étude que, le feuillet de graphène n'affecte pas les propriétés photodynamiques de la molécule de ZnPc et qu'il permet, de plus, de stabiliser la molécule sur la membrane de la cellule à traiter. En effet, le graphène est un bon candidat pour transporter et stabiliser la molécule de ZnPc près d'une membrane cellulaire pour une durée plus importante que dans le cas de la molécule seule, permettant ainsi une amélioration possible de la PDT. Le système ZnPc/graphène permet d'envisager un meilleur rendement PDT tout en utilisant un plus petit nombre de molécules de ZnPc. Cette étude demandera à être généralisée car le graphène semble être un excellent candidat pour la vectorisation d'autres molécules potentiellement intéressantes pour la PDT.

[1] E. Duverger, F. Picaud, L. Stauffer, Ph. Sonnet, ACS Applied Materials and Interfaces 9 (2017) 37554.

## Structure and dynamics of silver atoms and nanoparticles on a substrate

J. Puibasset<sup>1</sup>

*1 - Interfaces, Confinement, Matériaux et Nanostructures, UMR7374, CNRS, Université d'Orléans, France*

*E-mail: puibasset@cnrs-orleans.fr*

Properties of metallic nanoparticles differ from bulk. Moreover, experimental and simulation data show that the support used to produce these nanoparticles, despite weakly interacting like amorphous silica, may have a non-negligible effect, in particular on the morphology and structure of the nanoparticle [1]. It is also expected to play an important role regarding the kinetics of the formation of the nanoparticles.

Considering the typical dimensions of the system (few nanometers), a molecular approach based on effective potentials will be considered. The metal-metal interaction is modeled by a tight-binding semi-empirical potential within the second moment approximation (TB-SMA), the interactions between atoms constituting silica are described by the mTTAM potential, and the metal-silica interaction is based on a Lennard Jones potential, with parameters adjusted on experimental and Density Functional Theory calculations.

Our poster will briefly present the silver-silica potentials we have developed. It will then focus on zero-kelvin results obtained by energy minimizations, in particular the relative stability of different structures in contact with the silica support. The effect of the silica roughness will be considered. We will then present the dynamics of Ag atoms on the surface (diffusion) and the effect of temperature on the silver mobility on the surface.

[1]-A. C. Ngandjong, C. Mottet, and J. Puibasset, J. Phys. Chem. C 120, 8323 (2016), J. Phys. Chem. C 121, 3615 (2017)

## **Nature of surface and solvent effects on chain conformations in interfaces of polymers grafted on silica. Study by nmr technique**

T. Tajouri<sup>1</sup>, M.A. Ben Maryem<sup>1</sup>, M.Guettari<sup>1</sup>  
*1 - University of Tunis, IPEIT- "UR11ES88", Tunis, Tunisia*

*\*e-mail: tajourit2001@yahoo.fr*

The polymer/solid interface of Poly (ethylene oxide) (PEO) grafted on silica is studied by <sup>1</sup>H NMR. The modification of the characteristics of this interface depends essentially on the behavior of particular chains, such as conformation, mobility,...etc. A noticeable influence of the nature of the surface and solvent on the conformation of the grafted macromolecules was observed. For precipitated silica the chains adopted a disordered conformation whereas for pyrogenic silica they formed a more uniform layer. The grafting ratio and the solvent can both modify the conformations of the chains. Different models are proposed for the two extreme grafting ratio levels in both the absence and the presence of solvent. Without solvent, for both grafting ratios, the macromolecules lie very flat on the silica and the layer is more organized, especially at high grafting ratio. In the presence of solvent the chains spread out in the solvent, adopt a more extended conformation and the local concentration of monomers at the surface decreases.

**XPS, XPD, RHEED and LEED investigations of 2D Si layer epitaxied on LaAlO<sub>3</sub> (111) substrate.**

<sup>1</sup>C. Ben Azzouz, <sup>1</sup>A. Akremi, <sup>2</sup>M. Derivaz, <sup>2</sup>J-L. Bischoff and <sup>2</sup>D. Dentel

*1- Université de Carthage, Laboratoire de physique des matériaux, Unité de service commun spectromètre de Surfaces, Faculté des Sciences de Bizerte, 7021 Jarzouna Bizerte, Tunisia*

*2- Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), UMR 7361 CNRS-UHA, Université de Haute Alsace, 3bis rue Alfred Werner, 68093 Mulhouse, France*

*\*e-mail: benazzouzchiraz@yahoo.fr*

Using X-ray photoelectron spectroscopy, X-ray photoelectron diffraction (XPD), reflection high-energy electron diffraction (RHEED) and (LEED), we have systematically investigated the structural and chemical properties of the initial epitaxial growth of one Silicon monolayer on the high- $\kappa$  crystalline oxide LaAlO<sub>3</sub> (111). Deposits were performed by molecular beam epitaxy (MBE) at different substrate temperatures. Our study reveals that: (1) The deposited single layer is formed by two dimensional (2D) structures of Si; (2) Depending on the substrate temperature, different superstructures are observed: (2x2) and (4x4). (3) The crystalline monolayer of Si 2D is thermally stable; and finally the deposited silicon layer is a flat structure with low buckling. Our results suggest that the two-dimensional crystalline layer of Si deposited on LAO (111) could be attributed to a plane of silicene.

## GeTe growth on Si(111)

Boris Croes\*, Fabien Cheynis, Stefano Curiotto, Pierre Müller, Frédéric Leroy  
 CINA-M-CNRS UMR 7325, Campus de Luminy Case 913  
 13288 Marseille Cedex 9, France

\*E-mail: croes@cinam.univ-mrs.fr

In spintronics an important goal is to be able to control the spin of the electron in solids without applying magnetic fields. The most promising mechanism is based on the Rashba effect and the subsequent spin polarization of electronic bands induced in such systems. Most research has previously focused on 2D electron systems and they lack an important property concerning functionalization, namely, the possibility to switch or tune the spin texture. This limitation can be overcome in a new class of functional materials displaying Rashba splitting coupled to ferroelectricity. In that respect an electrically switchable bulk-Rashba system has been proposed: the room-temperature ferroelectric semiconductor GeTe (Curie temperature:  $\approx 700$  K, polarization:  $64\text{--}70 \mu\text{C cm}^{-2}$ ). Such a material would lead to a nonvolatile control of the Rashba induced spin polarization and appears to be scalable, since the ferroelectricity in GeTe persists down to the nm-scale.

Before studying the ferroelectric properties, we have grown and characterized thin films of GeTe on Si(111) single crystal by Molecular Beam Epitaxy (MBE). Despite a significant lattice mismatch of  $\sim 8.5\%$  between Si(111) and GeTe(111), the epitaxial growth of GeTe with a single out-of-plane orientation on a Si(111)-(7  $\times$  7) surface has already been demonstrated. However, the presence of in-plane twisted domains spaced by  $\pm 7^\circ$  and  $\pm 2.5^\circ$  were observed. To improve the layer quality we have grown first a monolayer of Sb on Si(111). The induced surface reconstruction Si(111)-( $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ )Sb reduces the presence of in-plane twisted domains for GeTe growth favouring perfectly single crystalline GeTe(111) thin layers. We have adjusted the growth parameters to improve the layer quality measuring *in situ* the diffraction pattern by RHEED (Reflection High Energy Electron Diffraction). In addition the layer morphology has been analyzed through *ex situ* AFM (Atomic Force Microscopy) measurements and X-ray diffraction. The morphology shows a flat surface with triangular features. The crystallographic structure is dominated by one domain revealing a rather single crystalline structure (GeTe(001)//Si(111) and GeTe(-100)//Si(-211)). To gain deeper understanding in the growth process preliminary results by Scanning Tunneling Microscopy and Low Energy Electron Microscopy will be shown. In a second part of the project, as soon as GeTe(111) thin films are obtained, we will study *in situ* the ferroelectric domain dynamics by Mirror Electron Microscopy and Low Energy Electron Microscopy. The domain polarization switching as function of temperature and thickness will be studied until the Curie temperature.

### Bibliography

- [1] Toward Truly Single Crystalline GeTe Films: The Relevance of the Substrate Surface – R. Wang et al -J. Phys. Chem. C 2014, 118, 29724–29730
- [2] Electric Control of the Giant Rashba Effect in Bulk GeTe – P. Barone et al -Adv. Mater. 2013, 25, 509–513
- [3] Giant Rashba-Type Spin Splitting in Ferroelectric GeTe(111) – M. Liebmann et al. -Adv. Mater. 2016, 28, 560–565
- [4] Ferroelectric Control of the Spin Texture in GeTe – C. Rinaldi et al -Nano Lett., 2018, 18 (5), pp 2751–2758

## Room temperature ferromagnetism in two-dimensional materials

<sup>1,\*</sup>A. Purbawati, <sup>1</sup>M. Nunez-Regueiro, <sup>1</sup>V. Bouchiat, <sup>1</sup>J. Coraux, <sup>1</sup>N. Rougemaille

*1- Institut Néel, CNRS and Université Grenoble Alpes, Grenoble, France*

*\*e-mail: anike.purbawati@neel.cnrs.fr*

Recent studies in thinning bulk-ferromagnetic layered materials to a monolayer [1] and bilayer [2] have showed that intrinsic ferromagnetic order can persist to this ultrathin limit at low temperature. These magnetic two dimensional (2D) materials provide an exciting opportunity to study new phenomena in 2D magnetism and enable new spintronic applications. While low-temperature magnetic 2D materials are valuable for proof of concept devices, most applications will require ferromagnetic order at room temperature. In our group, a new layered material has been synthesized, which exhibits intrinsic ferromagnetism at room temperature in its bulk form and can be thinned down to few layers. Demonstrating room temperature ferromagnetism in a few or single layer is our main purpose. In this work, we demonstrate our preliminary magnetic measurements on this material of thickness down to several 10 nm. The measurements indicate the persistence of intrinsic ferromagnetism at room temperature when the materials are thinned down. Further optimization in exfoliation technique together with high sensitivity magnetic and structural characterization are needed in order to further investigate the evidence of ferromagnetism in the monolayer limit and to characterize their magnetic properties, i.e. magnetic anisotropy, Curie temperature, magnetization texture.

[1] Huang et al. Layer-dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit. *Nature* 546, 270 (2017)

[2] Gong et al. Discovery of intrinsic ferromagnetism in two-dimensional van der Waals crystals. *Nature* 546, 265 (2017)

## **Electronic characterization of functional oxides using advanced photoemission spectroscopy techniques**

<sup>1,2</sup>Catalina Ruano\*, <sup>2</sup>Françoise Deschamps, <sup>2</sup>François Bertran, <sup>2</sup>Patrick Lefèvre, <sup>3</sup>Thomas Maroutian, <sup>4</sup>Aurelie Solignac, <sup>5</sup>Manuel Bibes, <sup>5</sup>Jin Lee, <sup>6</sup>Daniel Preziosi and <sup>2</sup>Julian Rault

*1- Institut Jean Lamour, Campus ARTEM, 2 allée André Guinier BP 50840, 54011 Nancy Cedex, France*

*2- Synchrotron-SOLEIL, BP 48, Saint-Aubin, F91192 Gif sur Yvette CEDEX, France*

*3- Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies, CNRS, Université Paris-Sud, Université Paris-Saclay, Bâtiment 220, Rue André Ampère, F-91405 Orsay, France*

*4 - SPEC, CEA, CNRS, Université Paris-Saclay, CEA Saclay 91191 Gif-sur-Yvette,*

\*catalina.ruano-merchan@univ-lorraine.fr

The properties of the La<sub>0.7</sub>Sr<sub>0.3</sub>O<sub>3</sub> (LSMO)/SrTiO<sub>3</sub> (STO) interface have attract interest since the discovery of the possible use of this composite as a Magnetic Tunnel Junctions (MTJs) due to its half-metallic character in its ferromagnetic phase, which leads to high tunnel Tunnel MagnetoResistance (TMR). On the other side, interesting studies on thin films of perovskite nickelates have been performed in order to understand their properties, such as anisotropic thermoelectrical responses and magnetoelectric multiferroicity. Specifically, for NdNiO<sub>3</sub> (NNO), Metal Insulator Transition (MIT) has been observed rising the interest of studying its electronic structure as a function of temperature.

In this work, advanced Photoelectron Spectroscopy (PES) techniques are used to characterize the electronic structure of LSMO and NNO oxides. Angular-Resolved Photoemission Spectroscopy (ARPES) is used to obtain the electronic band diagram and Fermi Surface of NNO thin films. Parallel to this experiment, the study of the band alignment and chemical states as a function of in-situ applied bias and barrier type in LSMO oxides is performed by the Hard X-ray Photoemission Spectroscopy (HAXPES) technique. These experiments reflect the power of the photoemission spectroscopy as a method for understand the electronic structure of solids.

## Charge and spin transport in GaAs nanowires grown by HVPE

H. Hijazi<sup>1\*</sup>, G. Monier<sup>1</sup>, D. Paget<sup>2</sup>, F. Cadiz<sup>2</sup>, P. A. Alekseev<sup>3</sup>, V. P. Ulin<sup>3</sup>,  
V. L. Berkovits<sup>3</sup>, C. Leroux<sup>4</sup>, C. Bougerol<sup>5</sup>, D. Castelluci<sup>1</sup>, A. Trassoudaine<sup>1</sup>, E. Gil<sup>1,6</sup>, V. Dubrovskii<sup>6</sup>,  
C. Robert-Goumet<sup>1</sup>, Y. André<sup>1,6</sup>

1- Université Clermont Auvergne, CNRS, SIGMA Clermont, Institut Pascal, F-63000 Clermont-Ferrand, France.

2- Physique de la matière condensée, Ecole Polytechnique, CNRS, Université Paris-Saclay, 91128 Palaiseau, France.

3- Ioffe Institute, Saint-Petersburg 194021, Russia.

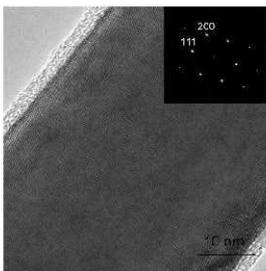
4- Université du Sud Toulon-Var, IM2NP, 83957, La Garde Cedex, France.

5- CEA-Grenoble NPSC/PHELIQS/INAC 38054 Grenoble.

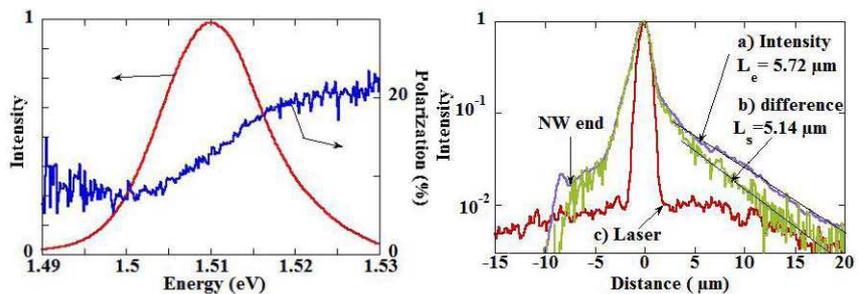
6- ITMO University, Kronverkskiy prospekt 49, - 197101 St. Petersburg, Russia.

Email: [hadi.hijazi@uca.fr](mailto:hadi.hijazi@uca.fr)

Hydride Vapor Phase Epitaxy process has already demonstrated the growth of GaAs NWs with exceptional length and high purity cubic zinc blende structure. NWs were grown at a fast solidification rate  $170 \mu\text{m}\cdot\text{h}^{-1}$ , facilitated by the high decomposition frequency of the chloride growth precursors involved in HVPE. In VLS-HVPE, continuous and predominant feeding through the Au-Ga liquid catalyst occurs with no mass and kinetic hindrance, favoring axial rather than radial growth, and leading to twin-free NWs with a constant cylinder shape over unusual length<sub>1</sub> (Fig1). In this work, we present the potential of Au-assisted (VLS) growth to produce high crystalline ultra-long GaAs NWs,  $40 \mu\text{m}$  to  $100 \mu\text{m}$  long with constant diameter in the range  $50\text{-}200 \text{ nm}$  on silicon substrates. Prior to the growth, gold nanodroplets organization had been investigated by using SEM and electronic spectroscopy. In order to enhance the performance of the electronic devices, the electronic spin gained importance in the last years, it can be used as a supplementary factor to transport information. We present a charge and spin transport investigation in ultra-long ( $50\text{-}80\mu\text{m}$ ) GaAs NWs grown by HVPE on silicon (111) substrates. We have investigated individual NW at  $6 \text{ K}$  and  $300 \text{ K}$  using polarized  $\mu$ -Photoluminescence ( $\mu\text{PL}$ )<sub>2</sub>. This technique uses a local generation of spin-polarized photoelectrons by a tightly-focused light excitation. The light emitted from electrons after diffusive transport is then spatially and spectrally analyzed to get charge ( $L_e=5.72 \mu\text{m}$ ) and spin ( $L_s=5.14 \mu\text{m}$ ) diffusion lengths (Fig.2). A comparative study of the effect of surface nitridation using hydrazine solutions<sub>3</sub> and plasma treatment in Ultra High Vacuum has been carried out.



**Fig 1.** HRTEM image of a GaAs NW taken along the [01-1] zone axis of the ZB structure. The growth direction is  $\langle 111 \rangle B$ . No stacking faults were observed.



**Fig 2.** Left image: PL and electronic polarization spectra for a GaAs NW after chemical passivation by a hydrazine solution. Right image: spatially-resolved profiles of the  $\sigma^+$ - and  $\sigma^-$ - polarization of the luminescence from the same NW showing the spatial profile of the photoelectron charge (a) and spin (b) densities along with the laser spatial profile (c).

1 Y. André et al., The Journal of Chemical Physics 140, (2014) 194706.

2 I. Favorskiy, et al Rev. Sci. Inst. 81, (2010) 103902.

3 V. L. Berkovits, et al. Appl. Phys. Lett. 90, (2007), 022104.

4 This work is supported by the CNRS and the CPER Region Auvergne.

We are grateful to K. Lahlil for assistance with chemical NW passivation.

## Towards two-dimensional molecular crystals

A.C. Gómez Herrero<sup>\*1</sup>, E. Mazaleyrat<sup>2</sup>, C. Sánchez-Sánchez<sup>3</sup>, J.A. Martín-Gago<sup>3</sup>, V. Guisset<sup>1</sup>,  
P. David<sup>1</sup>, F. Chérioux<sup>4</sup>, and J. Coraux<sup>1</sup>

1- CNRS, Institute NEEL, F-38042 Grenoble, France

2- CEA-INAC, 17 Avenue des Martyrs, 38042 Grenoble, France

3 - CSIC, Instituto de Ciencia Materiales Madrid, C/ Sor Juana Inés de la Cruz, 3, 28049 Madrid, Spain

4 - CNRS, Institute FEMTO-ST, F25030 Besançon, France

*\*e-mail: ana-cristina.gomez-herrero@neel.cnrs.fr*

Condensed matter research has been focused in the generation of novel classical and quantum phases in the past years. The emergence of topological insulators (TIs)<sup>[1,2]</sup>, materials characterized by the presence of conducting states in their edges and an insulating behaviour in their bulk, brings new candidates for the fields of spintronics, micro-electronics and thermoelectricity.

The long-term goal of this work is to demonstrate the concept of TI in the form of a two-dimensional organometallic network formed through on-surface polymerization reaction. Polymerization of molecular units can yield low-cost crystalline materials with the additional advantage of properties engineering thanks to molecular unit design.

Here, we propose the polymerization reaction between triphenylene family molecules and metallic centers in ultra clean conditions in order to demonstrate the formation of new electronic states. In this contribution we will present the self-assembly process of mentioned molecules, evaporated on a single-crystal Cu(111) substrate held at room temperature and the evolution of the formed molecular structures by increasing the temperature of the system. By this post-annealing process, we expect to induce the on-surface reaction between the evaporated molecules and the Cu ad-atoms giving rise to the desired two-dimensional organometallic network. For the purpose of gaining fine insights into the structure and formation of the networks we use variable-temperature scanning tunneling microscopy and X-ray photoelectron spectroscopy.

### REFERENCES:

[1] C L Kane, E J Mele. Quantum spin Hall effect in graphene. Phys. Rev. Lett. vol.95, p. 226801 (2005)

[2] M König, S Wiedmann, C Brune, A Roth, H Buhmann, L W Molenkamp, X-L Qi, S-C Zhang. Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells. Science vol.318, p.766 (2007)

## The LOREA ARPES beamline at the ALBA synchrotron

*D. Pierucci<sup>1\*</sup>, F. Bisti<sup>1</sup>, M. Tallarida<sup>1</sup>, A. Crisol<sup>1</sup>, E. Pellegrin<sup>1</sup>, L. Aballe<sup>1</sup>,  
S. Ferrer<sup>1</sup> and J. Nicolas<sup>1</sup>*

*1 - Alba Synchrotron Light Facility, CELLS, Carrer de la llum 2-26, 08290, Cerdanyola del Vallès,  
Barcelona, Spain*

*\*e-mail: dpierucci@cells.es*

In the present work, we report the design and construction status of LOREA, the ALBA synchrotron beamline devoted to electronic structure investigation by means of Angle Resolved Photo-Emission Spectroscopy (**ARPES**).

LOREA is the ninth beamline of the **ALBA synchrotron radiation source**, it is under construction and will be in operation in 2020.

The beamline is designed to cover **the photon energy range of 10-1000 eV**, with continuously variable polarization, resolving power of more than  $10^4$  in the whole range, and spot size of about  $10 \times 10 \mu\text{m}^2$ . The photon flux is expected to be of the order of  $10^{13}$  (ph/s/0.1%BW) for photon energies up to 350 eV, and above  $10^{12}$  (ph/s/0.1%BW) in the 350-1000 eV. Thanks to the wide energy range and high photon flux, LOREA will be suitable for high resolution **VUV ARPES** investigation in the range of 10-200 eV, with the possibility to extend the ARPES measurements in the 200-600 eV energy range (**Soft X-ray ARPES**). In addition, core level spectroscopy, resonant photoemission and X-ray absorption spectroscopy will be accessible in the whole energy range.

The end station of LOREA will be composed by a central radial distribution chamber to which all other vessels are connected, including chambers for ARPES investigation, **in situ UHV deposition and characterization**, high pressure deposition (**Chemical Vapor Deposition, CVD**, and **Atomic Layer Deposition, ALD**), **organic molecule** deposition; sample storage, docking of **vacuum suitcases**, docking of **STM**, and fast entry load lock.

## Contrôle de la phase cristalline de nanofils de GaAs auto-catalysés

T. DURSAP<sup>1,\*</sup>, M. VETTORI<sup>1</sup>, C. BOTELLA<sup>1</sup>, A. DANESCU<sup>1</sup>, M. BUGNET<sup>2</sup>,  
G. PATRIARCHE<sup>3</sup>, J. PENUELAS<sup>1</sup>, M. GENDRY<sup>1</sup>

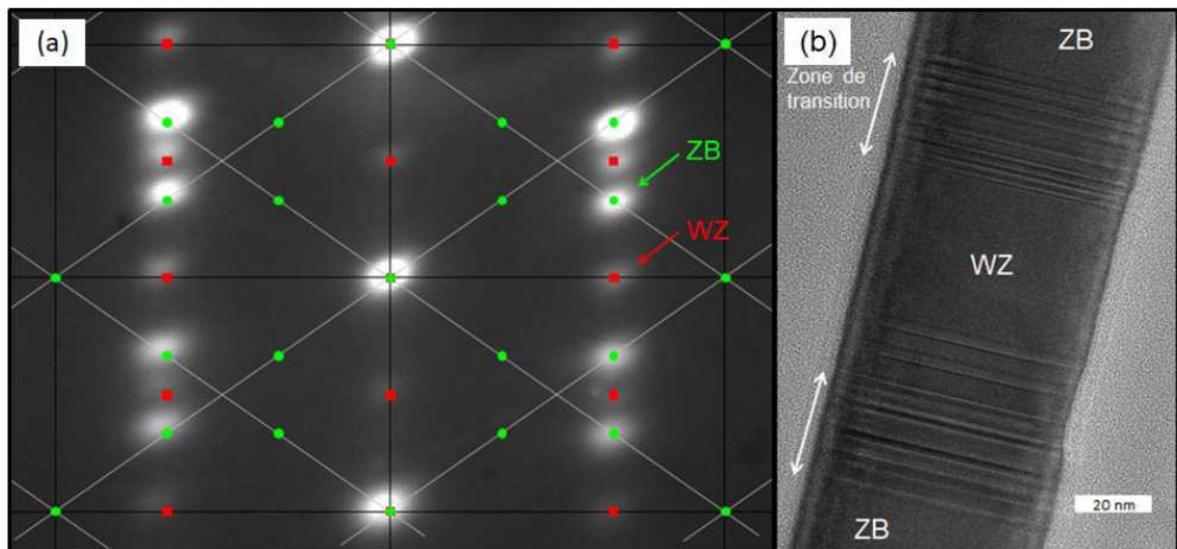
1- Institut des Nanotechnologies de Lyon – Université de Lyon, UMR 5270 – CNRS, Ecole Centrale de Lyon,  
36 avenue Guy de Collongue, F-69134 Ecully cedex, France

2- MATEIS – Université de Lyon, UMR 5510 – CNRS, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon,  
7 avenue Jean Capelle, 69621 Villeurbanne cedex, France

3- Centre de Nanosciences et de Nanotechnologies – Université Paris-Saclay, UMR 9001 –  
CNRS, site Marcoussis, Université Paris-Saclay, Route de Nozay, 91460 Marcoussis, France

Email: [thomas.dursap@master.ec-lyon.fr](mailto:thomas.dursap@master.ec-lyon.fr)

Les nanofils (NFs) semiconducteurs sont sujets à de nombreuses études en raison de leurs propriétés spécifiques liées à leur dimensionnalité 1D. Les NFs de semiconducteurs III-V obtenus par croissance en mode VLS présentent la particularité de croître selon une structure Zinc-Blende (ZB) ou Wurtzite (WZ) [1] selon les conditions de croissance, en particulier des flux des éléments III et V. Il est maintenant admis que la structure de ces NFs est dictée par l'angle de mouillage de la goutte du catalyseur qui dépend de ces flux III et V. Dans ce travail, nous avons étudié plus particulièrement la structure cristalline de NFs de GaAs auto-catalysés (par une goutte de Ga) fabriqués par épitaxie par jets moléculaires en suivant le diagramme RHEED in-situ au cours de la croissance (Fig.1.a). Les diagrammes de diffraction des structures ZB et WZ étant différents selon l'azimut [1-10], il est possible de mesurer l'évolution de l'intensité de taches de diffraction spécifiques ZB et WZ en cours de croissance en fonction des conditions de croissance (flux de Ga et As en particulier). Le contrôle de ces flux permet ainsi un contrôle de la structure cristalline ZB ou WZ des NFs en suivant le diagramme RHEED en cours de croissance. Des séquences de segments ZB et WZ ont ainsi pu être réalisées dans ces NFs de GaAs (Fig.1.b).



**Figure 1 :** (a) Diagramme RHEED (azimut [1-10]) de NFs de GaAs. Les points verts représentent les taches ZB, les carrés rouges représentent les taches WZ. Les flèches indiquent les taches utilisées pour l'analyse. (b) Image TEM d'une séquence ZB-WZ-ZB.

### Référence:

- [1] F. Glas, J.C. Harmand, G. Patriarche, Physical Review Letters, 99, 146101, **2007**
- [2] D. Jacobsson, F. Panciera, J. Tersoff, M. C. Reuter *et al*, Nature, 531, 317, **2016**.

Les auteurs remercient l'Agence Nationale de la Recherche (ANR) pour son soutien financier dans le cadre de l'ANR beep (ANR-18-CE05-0017).

## Smectic Liquid Crystal/ Gold nanoparticles composites

<sup>1</sup> S.DO, <sup>1,\*</sup> H.Jeridi, <sup>1</sup> A.Missaoui, <sup>1</sup> D.Coursault, <sup>2</sup> A.Coati, <sup>2</sup> Y.Garreau, <sup>1</sup> B.Gallas, <sup>1</sup> E.Lhuillier, <sup>3</sup> D. Constantin, <sup>3</sup> B.Pansu, <sup>4</sup> D. Badonneau, <sup>1</sup> S.Royer, <sup>1</sup> D.Limagne, <sup>1</sup> E.Briand, <sup>1</sup> N.Goubet, <sup>1</sup> M.Goldman, <sup>1</sup> B.Croset, <sup>1</sup> E.Lacaze.

<sup>1</sup> Institut des NanoSciences de Paris, UMR 7588 CNRS, Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, 75005 Paris, France. <sup>2</sup> Synchrotron Soleil, BP 48, L'Orme des Merisiers, 91192 Gif sur Yvette, France. <sup>3</sup> Laboratoire de Physique des Solides, UMR 8502 CNRS, Univ Paris 11, 91405 Orsay, France. <sup>4</sup> Institut Prime, UPR 3346 CNRS, Univ de Poitiers, 86962 Futuroscope Chasseneuil, France.

\*e-mail: jeridi@insp.jussieu.fr

We study the phenomena responsible for the self-organization of gold nanoparticles (NPs) in a liquid crystal (LC) matrix. This self-organization is induced by the topological defects of the LC [1,2].

We prepare thin LC films (thickness around 200 nm) characterized by the presence of linear topological defects (dislocations) well oriented at large scale. Gold NPs (diameter between 4nm and 9nm) are then trapped in these defects forming chains oriented along the linear dislocations [1,3]. This gold NPs organization is characterized by an electromagnetic coupling in the direction of the chains which drives the anisotropy of the optical response (plasmon resonance) allowing the extinction properties to be controlled by light polarization. Moreover, an evolution of the NPs organization is detected by increasing the density of the gold NPs [1]. In this case chains transform into a hexagonal monolayer whose direction is imposed by the linear defects. On the other hand, a compression of both NPs' chains and 2D monolayers is observed to be imposed by the LC matrix. We analyse this behaviour based on a model built around a new determination of the structure of the smectic matrix, which allows for the determination of the LC dislocation core energy.

Finally, by this study we determine at the same time the specific structure of nanoparticle self-organizations and the one of the topological defects of the smectic LC and their mutual relationship.

[1] D. Coursault, and al., *ADV. Mater*, 2012, 24, 1461-1465.

[2] D. Coursault and al., *Soft Matter*, 2016, 12, 678-688.

[3] D. Coursault, and al., *ACS Nano*, 2016, 12, 11678-11689.

## Structure et croissance de germanène sur Al(111)

<sup>1,\*</sup>K. Zhang, <sup>1</sup>R. Bernard, <sup>1</sup>Yves Borensztein, <sup>1</sup>G. Prévot

*<sup>1</sup>Institut des NanoSciences de Paris, SU - CNRS,  
Paris, France*

*e-mail: zhang@insp.jussieu.fr*

Depuis la découverte du silicène, de nombreuses études ont porté sur les analogues du graphène pour les éléments de la colonne IVA: Si, Ge, Sn. Par rapport au graphène, le germanène possède, du fait d'un plus fort couplage spin-orbite, un gap plus important ce qui le rend intéressant pour des applications électroniques. Par contre, comme il n'existe pas de structure lamellaire volumique pour le germanium, le germanène ne peut être obtenu que par épitaxie. Sa croissance a ainsi été annoncée sur Au(111) [1], Pt(111) [2] ou Al(111) [3].

Nous avons suivi en temps réel la croissance de germanène sur Al(111) par microscopie tunnel (STM), entre 300 et 360K. Dans cette gamme de température, deux différentes reconstructions sont observées :  $(3\times 3)$  et  $(\sqrt{7}\times\sqrt{7})R19.1^\circ$ , présente sous forme de petits domaines séparés par des parois. Cette dernière est moins stable car, à 360 K, au cours du dépôt, les domaines de  $(\sqrt{7}\times\sqrt{7})$  se transforment en larges régions de structure  $(3\times 3)$ .

Par ailleurs, les atomes d'Al sont très mobiles lors du dépôt. On observe que les bords de marche avancent lors de la croissance (voir Fig. 1). Cela montre que le germanène se forme par insertion dans le plan de surface, à l'instar de ce que nous avons déjà mis en évidence pour le système silicène/Ag(111). [4] Une éventuelle formation d'alliage ne peut pas être exclue.

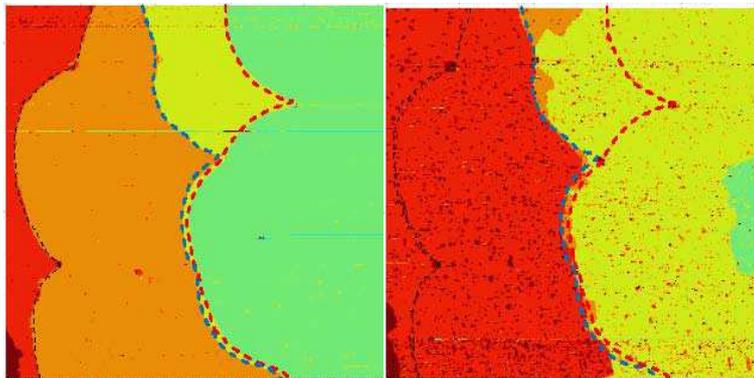


Fig. 1: Observation de la surface d'Al(111) avant et après dépôt de Ge. La position des marches initiales est indiquée en pointillé. L'échelle de hauteur va du vert au rouge. Taille des images : 400×400 nm<sup>2</sup>.

[1] M. Davila et al., New J. Phys. 2014, 16, 095002

[2] L. Li et al., Adv. Mater. 2014, 26, 4820

[3] M. Derivaz et al., Nano Lett. 2015, 15, 2510

[4] G. Prévot et al., Appl. Phys. Lett. 2014, 105, 213106

## Epitaxial Co<sub>2</sub>Mn-based Heusler alloys for spintronics : Half Metal Magnet investigation

Charles Guillemard<sup>1,2</sup>, S. Petit Watelot<sup>1</sup>, F. Bertran<sup>2</sup>, P. Le Fèvre<sup>2</sup>, A. M. Bataille<sup>3</sup>,  
C. Rojas-Sanchez<sup>1</sup> and S. Andrieu<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>*Institut Jean Lamour, Université de Lorraine, Nancy, France*

<sup>2</sup>*Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Saint-Aubin, France*

<sup>3</sup>*IRAMIS / LLB, CEA Saclay, Gif-sur-Yvette, France*

...

\**e-mail: stephane.andrieu@univ-lorraine.fr*

Although giant magneto-resistance was discovered more than 25 years ago, the development of electronics harnessing the spin of electrons (spintronics) is still very active due to a continuous flow of discoveries. In most spintronics studies, standard transition metals like Fe, Ni, Co (and alloys thereof) are conveniently used. However, alternative materials with superior electronic properties are desirable. In particular, a class of materials called Half Metal Magnet (HMM) in theory satisfies such properties [1]. HMM compounds are metallic for majority spins and insulator for minority spins which leads to exciting properties for spin-polarized current in spintronic devices.

In particular, the ternary Co<sub>2</sub>Mn-based Heusler series seems to present the desirable property previously cited. For instance, 100 % of spin polarization was obtained in Co<sub>2</sub>MnSi(001) epitaxial layers grown by Molecular Beam Epitaxy (MBE) [2], confirming its HMM behavior. This property is predicted for other Co<sub>2</sub>Mn-based Heusler compounds [3]. In this study, electronic properties of MBE-grown epitaxial Co<sub>2</sub>MnZ with Z = Al, Si, Ga, Ge, Sn, Sb Heusler compounds are explored using Spin Resolved Photoemission Spectroscopy (SR-PES) experiments performed on the CASSIOPEE Beamline at SOLEIL synchrotron source. From the experimental spectra, we are able to point out an excellent agreement with *ab initio* calculations as well as the understanding of the global trend in their electronic structure.

---

[1] R. A. De Groot *et al. Phys. Rev. Lett.* **50**, 2024 (1983).

[2] S. Andrieu *et al. Phys. Rev. B* **93**, 094417 (2016).

[3] I. Galanakis *et al. Phys. Rev. B* **66**, 174429 (2002).

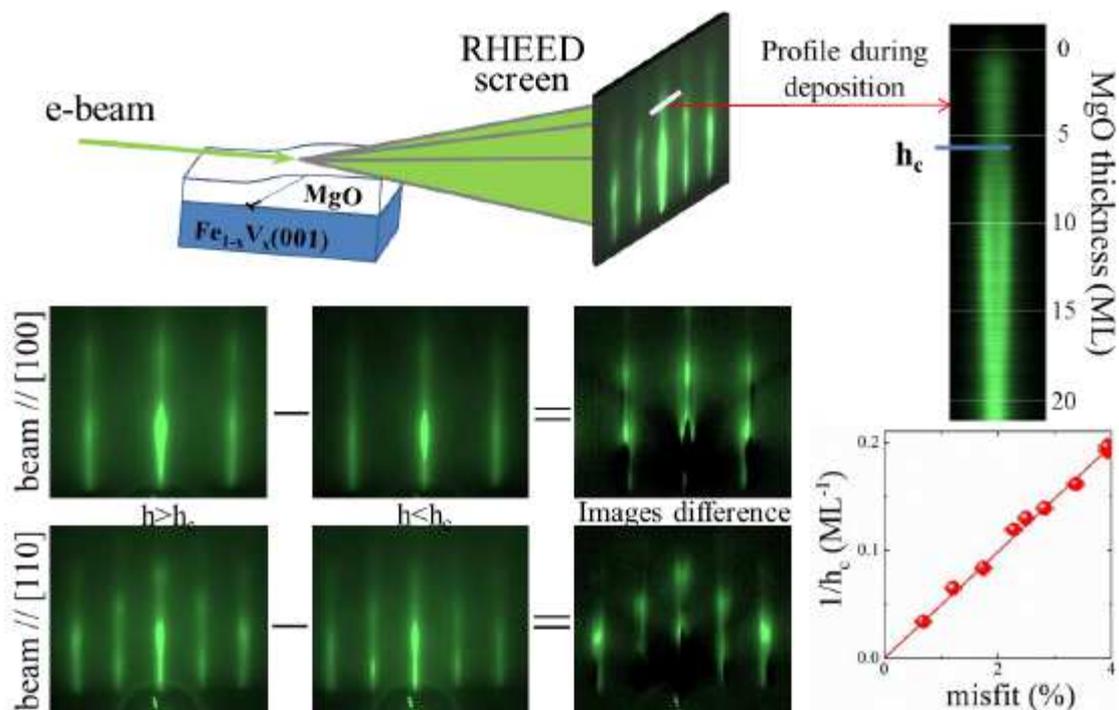
## Plastic relaxation of MgO epitaxially grown on BCC Fe<sub>1-x</sub>V<sub>x</sub> (001) alloys analyzed by electron diffraction

Frédéric Bonell<sup>1</sup>, Stéphane Andrieu<sup>1,\*</sup>

*1 - Institut Jean Lamour, Université de lorraine / CNRS, UMR7198, bd des aigillettes, 54506 Vandoeuvre France*

...  
\*e-mail: [stephane.andrieu@univ-lorraine.fr](mailto:stephane.andrieu@univ-lorraine.fr)

The epitaxial growth of MgO on Fe<sub>1-x</sub>V<sub>x</sub> buffer layers with adjustable lattice parameter is studied by electron diffraction (RHEED) in real time. At the onset of plastic relaxation in the MgO layer, a clear splitting of the diffraction rods is observed in <110> directions, as well as an increase in their length in the <100> directions. Splitting along <100> is also made visible through image background subtraction. These features originate from the surface strain above misfit dislocations, as previously proposed to account for satellite spots in LEED measurements. This explanation is supported by simulations of the diffraction patterns using kinematic diffraction theory. Observation of the diffraction rods splitting is shown to be a powerful way to check the presence of dislocations in MgO tunnel barriers and to accurately determine the critical thickness of plastic relaxation. (published in Surface Science 656, 140–147 (2017)).



## Self-organized homo-epitaxial growth of (100) Vanadium assisted by Oxygen surface reconstruction

S. Andrieu <sup>1,\*</sup>, P. Turban <sup>2</sup>, B. Kierren <sup>1</sup>

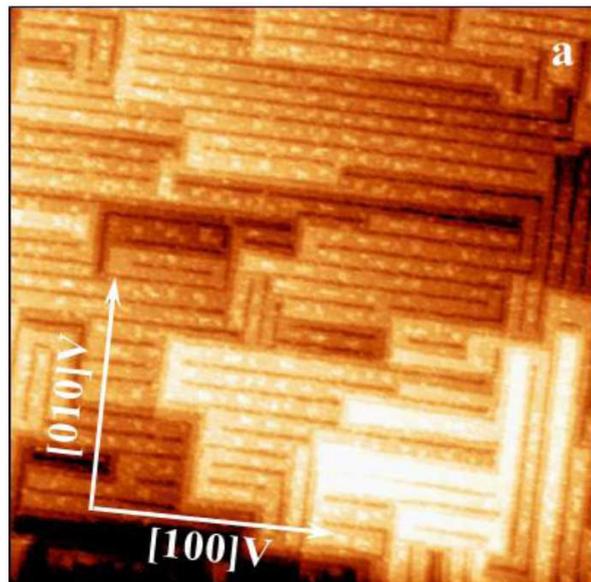
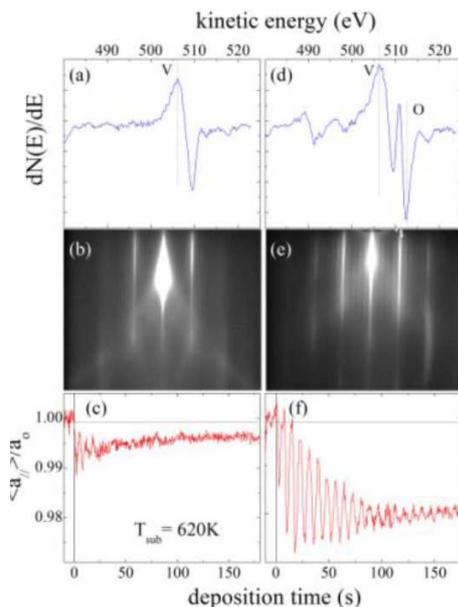
*1 - Institut Jean Lamour – Université de Lorraine – Nancy France*

*2- Institut de Physique de Rennes - Université de Rennes I, Rennes France*

...

\*e-mail: [stephane.andrieu@univ-lorraine.fr](mailto:stephane.andrieu@univ-lorraine.fr)

In this paper the effect of oxygen on the vanadium homoepitaxial growth process is analyzed by using Auger spectroscopy, electron diffraction and scanning tunneling microscopy. As the oxygen induced 1x5 surface structure got a lattice spacing 6% different from the pure V lattice, relaxation is observed by electron diffraction during the growth. The average in-plane lattice spacing is thus shown to be proportional to the oxygen surface concentration. The surface lattice relaxation is observed to exponentially vary with the number of deposited atomic planes. A kinetic model is proposed and allows us to explain these observations. Furthermore, it helps us to distinguish two regimes depending on growth temperature. At high temperature, the oxygen surface concentration during growth is due to oxygen upward diffusion from the underneath V layer. For lower temperature however, this upward diffusion is not efficient and another source of oxygen contamination is evidenced. When the oxygen surface concentration is sufficient, a spectacular self-organization is observed at the surface by surface microscopy. Ribbons shape islands are observed and are tentatively explained as a consequence of oxygen surface concentration and stress induced by the surface reconstruction (see Surface Science 651, 154-163 (2016)).



## **Dispositif de commutation ON/OFF bidimensionnel basé sur les interactions anisotropes de boîtes quantiques sur Si(100):H**

Mayssa Yengui<sup>1</sup>, Eric Duverger<sup>2</sup>, Philippe Sonnet<sup>3\*</sup>, Damien Riedel<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO), CNRS, Université Paris Sud, Université Paris Saclay, F-91405 Orsay, France*

<sup>2</sup>*Institut FEMTO-ST, Univ. Bourgogne Franche-Comté, CNRS, 15B avenue des Montboucons, F-25030 Besançon, France.*

<sup>3</sup>*Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), CNRS, UMR 7361, Université de Haute Alsace, 3 bis rue Alfred Werner, 68057 Mulhouse, France*

\*philippe.sonnet@uha.fr

L'étude et le contrôle des propriétés des boîtes quantiques à l'échelle atomique, telles que les liaisons pendantes (DBs) sur une surface, continue à faire l'objet d'intenses recherches au niveau international [1].

Les propriétés des DBs permettent d'étudier différents processus à l'échelle du nanomètre comme des bistables atomiques, le stockage d'une charge électrique, les interactions coulombiennes dans les automates cellulaires ou la formation d'états à liaison faible [1]. Encore aujourd'hui, contrôler les interactions de ces boîtes quantiques sur le silicium formant un dispositif bidimensionnel ayant une fonction définie reste un défi majeur.

A l'aide du microscope à effet tunnel à 9 K [2], nous avons caractérisé et exploité l'interaction anisotrope entre DBs sur la surface du Si(100):H afin d'ajuster leur degré d'hybridation. Nous avons montré que ces processus proviennent des interactions entre le réseau du silicium en subsurface et les liaisons pendantes induisant des distorsions de Jahn-Teller et une réorganisation locale des charges (charge ordering). Un dispositif 2D en forme d'étoile à trois branches a été réalisé. L'excitation électronique de ce prototype permet la modification réversible de sa structure électronique. En modifiant l'état de charge de ce dispositif, l'analyse de ses propriétés électroniques montre qu'il est possible de passer de manière réversible d'un état ON à un état OFF via l'ouverture d'un gap dans sa partie centrale. Nos résultats expérimentaux sont comparés avec succès à des simulations numériques utilisant la théorie de la fonctionnelle densité.

Ce travail fournit d'intéressantes perspectives pour l'étude de l'information quantique à l'échelle nanométrique. En effet, la structure électronique de ce type de dispositif permet, par exemple, une analogie avec l'interaction entre qubits.

[1] M.B. Haider, J.L. Pitters, G.A. DiLabio, L. Livadaru, J.Y. Mutus, R.A. Wolkow, Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 46805; A. Bellec, D. Riedel, G. Dujardin, O. Boudrioua, L. Chaput, L. Stauffer, Ph. Sonnet, Phys. Rev. Lett. 105 (2010) 048302; A. Bellec, L. Chaput, G. Dujardin, D. Riedel, L. Stauffer, Ph. Sonnet, Phys. Rev. B **88** (2013) 241406; S.R. Schofield, P. Studer, C.F. Hirjibehedin, N.J. Curson, G. Aeppli, D.R. Bowler, Nat. Commun. 4 (2013) 1649; M. Rashidi, W. Vine, T. Dienel, L. Livadaru, J. Retallick, T. Huff, K. Walus, R.A. Wolkow, Phys. Rev. Lett. 121 (2018) 166801

[2] M. Yengui, E. Duverger, Ph. Sonnet, D. Riedel, Nature Communication 8 (2017) 2211

## Structure de bandes d'une monocouche de silicatène sur Ru(0001)

G. Kremer<sup>1</sup>, Th. Pierron<sup>1</sup>, Y. Fagot-Revurat<sup>1</sup>, M. Sicot<sup>1</sup>, B. Kierren<sup>1</sup>, D. Malterre<sup>1</sup>, L. Moreau<sup>1</sup>, S. Lisi<sup>2</sup>,  
J. Coraux<sup>2</sup>, P. Pochet<sup>3</sup>, Y. Dappe<sup>4</sup>, P. Le Fèvre<sup>5</sup>, F. Bertran<sup>5</sup>, J. Rault<sup>5</sup>

1 - Institut Jean Lamour, UMR 7198, Université de Lorraine/CNRS, BP 70239, F-54506  
Vandoeuvre-les-Nancy, France ;

2 - Univ. Grenoble Alpes, Inst. NEEL, F-38000 Grenoble, France ;

3 - CEA, INAC-SP2M, F-38054 Grenoble, France ;

4 - SPEC (CNRS URA2464), SPCSI, IRAMIS, CEA Saclay, 91191 Gif-Sur-Yvette, France

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

E-mail : [thomas.pierron@univ-lorraine.fr](mailto:thomas.pierron@univ-lorraine.fr)

Les matériaux bidimensionnels (2D) possèdent des propriétés physiques radicalement différentes de celles du volume. Ils sont aujourd'hui largement étudiés en physique des surfaces, notamment les films ultra-minces de silice bidimensionnelle (silicatène) à la surface de métaux monocristallins [1,2]. Une telle réduction de dimensionnalité pourrait induire l'émergence de transitions de phases structurales réversibles, idéales en vue d'applications technologiques. C'est pourquoi la croissance de silicatène à la surface de substrats métalliques a été activement étudiée. Néanmoins, ses propriétés électroniques restent mal connues, en particulier sa structure de bandes.

Notre travail porte sur l'étude d'une monocouche de silicatène cristallin épitaxié sur Ru(0001).

La structure atomique a été étudiée par XPS, LEED et STM et est présentée en figure 1.(a). Ces données mettent en évidence une reconstruction de surface (2x2) ordonnée en nid d'abeilles et des liaisons chimiques caractéristiques du silicatène [1-4]. La structure de bandes, étudiée par ARPES, laisse apparaître des états dispersifs ayant une périodicité double par rapport à ceux du substrat, en accord avec nos calculs théoriques présentés en figure 1.(b). Nous démontrerons l'apport de cette étude dans la compréhension des propriétés structurales et électroniques du système, en particulier concernant les interactions de la monocouche de silicatène avec son substrat de Ru(0001).

### Bibliographie

- [1] S. Shaikhutdinov et al, *Advanced Materials* 25, (2012), 49
- [2] S. Shaikhutdinov et al, *Physical Review Letters* 95, (2005), 076103
- [3] S. Mathur et al, *Physical Review B* 92, (2015), 161410(R)
- [4] B. Yang et al, *Physical Chemistry Chemical Physics* 14, (2012), 11344

## Molecular Thin Films templated on Quasicrystalline Surfaces

<sup>1</sup>N. Kalashnyk, <sup>1</sup>É. Gaudry, <sup>1</sup>J. Ledieu, <sup>1</sup>M.C. de Weerd, <sup>2</sup>D. Wu, <sup>2</sup>T. Lograsso, <sup>3</sup>C. Cui,  
<sup>4</sup>A.-P. Tsai, <sup>1</sup>V. Fournée.

*1- IJL, UMR 7198 CNRS – Université de Lorraine, Nancy, France.*

*2 -Ames Laboratory, Ames IA, USA.*

*3 - Department of Physics, Zhejiang Sci-Tech University, Hangzhou, China.*

*4 - IMRAM, Tohoku University, Sendai, Japan.*

*\*e-mail: vincent.fournee@univ-lorraine.fr*

Quasicrystals are intermetallic compounds with long-range order but no translational invariance<sup>1</sup>. They have been identified in many different binary and ternary phase diagrams. Quasiperiodic structures have also been discovered in soft matter systems, in perovskite oxide thin films and even water thin films have been predicted to adopt quasiperiodic structures under specific conditions. In the present study, we will show that molecular films with long-range quasiperiodic order can also be grown, thus extending the concept of QCs to an even wider materials field.

Self-organized molecular films with long-range quasiperiodic order can be formed by using the complex potential energy landscape of quasicrystalline surfaces as templates<sup>2,3</sup>. By using STM, LEED and DFT calculations, we demonstrate that the long-range order arises from a specific subset of quasilattice sites acting as preferred adsorption sites for the molecules, thus enforcing a quasiperiodic structure in the film. These adsorption sites exhibit a local 5-fold symmetry resulting from the cut by the surface plane through the cluster units identified in the bulk solid. Symmetry matching between the selected molecular units and the substrate leads to a preferred adsorption configuration of the molecules, a feature unique to quasicrystalline surfaces, enabling efficient chemical bonding at the molecule-substrate interface. This finding offers opportunities to investigate the physical properties of model 2D quasiperiodic systems, as molecules can be functionalized to yield architectures with tailor-made properties.

<sup>1</sup> D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J. Cahn. *Phys. Rev. Lett.* **1984**, 53, 1951–1953.

<sup>2</sup> V. Fournée, É. Gaudry, J. Ledieu, M.C. de Weerd, D. Wu, T. Lograsso. *ACS Nano*, **2014**, 8, 3646-3653.

<sup>3</sup> N. Kalashnyk, J. Ledieu, É. Gaudry, C. Cui, A.P. Tsai and V. Fournée, *Nano Research*, **2018**, 11, 2129.

## Temperature and size-dependent atomic ordering in AgPt supported nanoparticles

1J. Pirart, 1C. Andreazza-Vignolle, 2R. Ferrando, 3C. Mottet, 4A. Coati,  
<sup>4,5</sup>Y. Garreau, <sup>6</sup>M. Jankowski, <sup>7</sup>M. De Santis, <sup>8</sup>R. Felici, <sup>1</sup>P. Andreazza\*

*1 - ICMN, CNRS, Univ. Orléans, F-45071 Orléans, France*

*2 - Università di Genova, Italy,*

*3 - CINaM, CNRS, Marseille,*

*4 - Synchrotron Soleil, Saint-Aubin,*

*5 - MPQ Université Paris-Diderot,*

*6 - ESRF, Grenoble,*

*7 - Institut Neel, CNRS, Grenoble, France*

*8 - CNR, Spin Institute, Tor Vergata, Italy*

...

*\*e-mail: pascal.andreazza@univ-orleans.fr*

Following the nanoscale atomic arrangement during nanoparticles' growth or phase transition is a challenge, especially in the case of nanoalloys which exhibit a large structural landscape (ordered, disordered, or segregated structures) [1]. One solution is to use methods that probe local and average features as well as nanometer to micrometer-sized data, providing complementary information about nanostructures' structure, morphology and chemical arrangement and that are much powerful when used together: transmission electron microscopy and grazing incidence small and wide angle X-ray scattering.

The originality of Pt-Ag system is to exhibit both a mixing and a phase separation tendency [2]. At the nanoscale, it has been widely study for its catalysis property showing a core(Ag)/shell(Pt) structure but few studies have been done on the equilibrium state. Supported Pt-Ag nanoalloy structural studies show phase transitions from disordered alloy to an ordered alloy depending on the annealing temperature and the composition. Especially, a original reversed size-dependent stabilization of ordered nanophases was revealed by combined HRTEM and STEM-HAADF experimental studies and atomistic simulations [3]. Oxidation by atomic oxygen and reduction by CO have been also investigated by in-situ X-ray scattering (GISAXS and GIWAXS) showing structural phase transitions depending on the mixing state of nanoalloys.

[1] P. Andreazza, V. Pierron-Bohnes, F. Tournus, C. Andreazza-Vignolle, V. Dupuis, Surf. Sci. Rep. 70, 2, 188–258, 2015.

[2] P. Durussel et P. Feschotte, J. Alloys Compd., 239, 2, 226–230, 1996.

[3] J. Pirart, A. Front, D. Rapetti, C. Andreazza-Vignolle, P. Andreazza, C. Mottet, R. Ferrando, Nature Com., 2019, in press.

## Low index surfaces of the $\text{Ba}_8\text{Au}_{5.25}\text{Ge}_{40.75}$ cage compound: nanostructuration and surface electronic structures

<sup>1</sup>K. Anand, <sup>2</sup>H. D. Nguyen, <sup>2</sup>M. Baitinger, <sup>3</sup>C. Allio, <sup>3</sup>C. Krellner, <sup>2</sup>Yu. Grin, <sup>1</sup>J. Ledieu, <sup>1</sup>V. Fournée, <sup>1,\*</sup>É. Gaudry

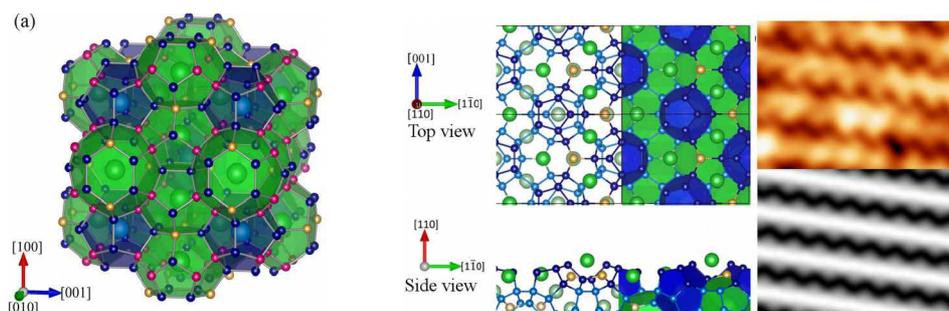
*1 - Institut Jean Lamour, Université. de Lorraine, CNRS, Nancy, France*

*2 - Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, Dresden, Germany*

*3 - Physikalisches Institut, Goethe-Universität, Frankfurt am Main, Germany*

\*e-mail: emilie.gaudry@univ-lorraine.fr

Designing surfaces with specific atomic and electronic structures is a main goal in nanoscience. One possible approach is based on complex intermetallic compounds, a class of materials possessing a large variety of atomic arrangements and properties. Among them, the covalently bonded Ba-Au-Ge intermetallic clathrates offer both tunable electronic structures -by controlling the chemical composition -and expected surface nano-structures, due to its bulk atomic arrangements forming two types of cages (Fig. 1-left). Using a combination of surface science techniques (LEED, STM) and theoretical methods based on DFT, we show that the  $\text{Ba}_8\text{Au}_{5.25}\text{Ge}_{40.75}(100)$  and  $\text{Ba}_8\text{Au}_{5.25}\text{Ge}_{40.75}(110)$  surfaces keep intact the cages of the bulk structure at the surface (Fig. 1-right). Surface structures are stabilized by electron charge transfers from protruding Ba to surface Ge and Au atoms, ensuring the saturation of the dangling bonds. The surface orientation controls the surface nanostructuration, by the selection of the types of protruding cages, while the surface electronic structure is impacted by the Au surface concentration [1,2].



**Figure 1** -Left: Bulk structure of the  $\text{Ba}_8\text{Au}_6\text{Ge}_{40}$  type-I clathrate (tetrakaidecahedra cages = green, dodecahedra cages = blue). Right: Surface structure of the (110) surface (top and side views) along with the experimental and theoretical STM images

[1] K. Anand et al., Charge Balance Controls the (100) Surface Structure of the  $\text{Ba}_8\text{Au}_{5.25}\text{Ge}_{40.75}$  Clathrate, *J. Phys. Chem. C*, 122, 2215-2220 (2018)

[2] K. Anand et al.,  $\text{Ba}_8\text{Au}_{5.25}\text{Ge}_{40.75}(110)$  : A Nano-Caged Surface Electronically Controlled by Ba and Au Adatoms, *J. Phys. Chem. C*, 122, 29298-29306 (2018)

## Co/Ni multilayers for spintronics: high spin-polarization and tunable magnetic anisotropy

S. Andrieu<sup>1\*</sup>, T. Hauet<sup>1</sup>, M. Gottwald<sup>1</sup>, A. Rajanikanth<sup>1</sup>, L. Calmels<sup>2</sup>, A.M. Bataille<sup>3</sup>, F. Montaigne<sup>1</sup>, S. Mangin<sup>1</sup>, E. Otero<sup>4</sup>, P. Ohresser<sup>4</sup>, P. Le Fevre<sup>4</sup>, F. Bertran<sup>4</sup>, A. Resta<sup>4</sup>, A. Vlad<sup>4</sup>, A. Coati<sup>4</sup>, Y. Garreau<sup>4,5</sup>

1 - Institut Jean Lamour, Université de Lorraine, Nancy, France

2 - CEMES-CNRS, Université de Toulouse, Toulouse, France

3 - Laboratoire Léon Brillouin, CEA Saclay, Gif sur Yvette, France

4 Synchrotron SOLEIL-CNRS, Gif-sur-Yvette, France

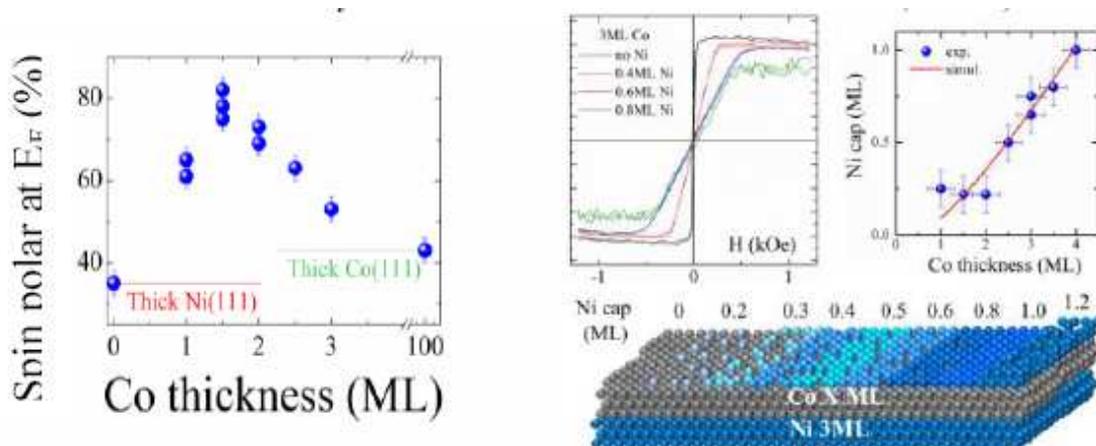
5 - Lab. Matériaux et Phénomènes Quantiques, Université Paris Diderot, France

...

\*e-mail: stephane.andrieu@univ-lorraine.fr

In this work we analyze, in detail, the magnetic properties of (Co/Ni) multilayers, a widely-used system for spintronics devices. We use spin-polarized photoemission spectroscopy, magneto-optical Kerr effect (MOKE), x-ray magnetic circular dichroism (XMCD) and anomalous surface diffraction experiments to investigate the electronic, magnetic and structural properties in [Co(x)/Ni(y)] single-crystalline stacks grown by molecular beam epitaxy. The spin-polarization depends sensitively on the surface termination and for Co terminated stacks is found to be much larger than bulk Co, reaching at least 90 % for 2 Co atomic planes. We observe a magnetization transition from in-plane to out-of-plane when varying the Ni coverage on a Co layer in the sub-monolayer range, confirming the interface origin of the perpendicular magnetic anisotropy in this system. Angle-dependent XMCD using strong applied magnetic field allows us to show that the orbital magnetic moment anisotropy in Co is responsible for the anisotropy and that our results are consistent with Bruno's model. Surface x-ray diffraction shows that fcc stacking is preferred for 1 monolayer Co-based superlattices, whereas the hcp stacking dominates for larger Co thicknesses. We finally explored the role of the stacking sequence on the Co and Ni magnetic moments by ab initio calculations.

See *Phys. Rev. Materials* 2, 064410 (2018)



## Structure and reactivity of Al<sub>5</sub>Co<sub>2</sub>(2-10): combination of surface diffraction and DFT calculations

<sup>1,2\*</sup>C. Chatelier, <sup>2,3</sup>Y. Garreau, <sup>1</sup>V. Fournée, <sup>1</sup>J. Ledieu, <sup>1</sup>M-C. de Weerd, <sup>2</sup>A. Vlad, <sup>2</sup>A. Resta, <sup>4</sup>L. Piccolo, <sup>5</sup>M. de Boissieu, <sup>6</sup>R. Felici, <sup>2</sup>A. Coati and <sup>1</sup>É. Gaudry

*1 - Institut Jean Lamour, UMR 7198 CNRS Université de Lorraine, F-54000 Nancy, France*

*2 - Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers Saint-Aubin, F-91192 Gif-sur Yvette, France*

*3 - Matériaux et Phénomènes Quantiques, UMR 7162 CNRS Université Paris Diderot, F-75013 Paris, France*

*4 - IRCELYON, UMR 5256 CNRS Université de Lyon, F-69626 Villeurbanne, France*

*5 - SIMAP, UMR 5266 CNRS Université Grenoble Alpes, F-38000 Grenoble, France*

*6 - CNR-SPIN, Area della Ricerca di Tor Vergata, I-00133 Roma, Italy*

*\*e-mail: corentin.chatelier@univ-lorraine.fr*

Replacing noble metal catalysts with inexpensive substitutes is a big challenge for the chemical industry. Several complex Al-based intermetallic compounds have already been identified as promising catalysts for hydrogenation reactions [1,2]. The understanding of the underlying processes requires a precise determination of the surface structure, as well as the thermodynamic quantities related to the adsorption of molecules involved in the reaction and the energy barriers of the elemental processes.

In this work, a precise surface model for Al<sub>5</sub>Co<sub>2</sub> is proposed from a combination of calculations based on the Density Functional Theory and surface science techniques [3], including Surface X-Ray Diffraction experiments (SixS Beamline, Synchrotron SOLEIL). A thermodynamic model is built, powered by theoretical adsorption energies, in order to take into account the reaction conditions (pressure and temperature) for the hydrogenation of butadiene. The calculated favorable reaction conditions are then compared to the experimental conditions.

This work illustrates the complementarity of experimental and theoretical approaches for the understanding of the reactivity of complex intermetallic surfaces. It also paves the way to investigations of more complex systems, like the quasicrystalline approximants Al<sub>13</sub>TM<sub>4</sub>.

[1] M. Armbrüster et al., Nat. Mater., 2012, 11, 690–693.

[2] L. Piccolo, Chem. Commun., 2013, 49, 9149

[3] M. Meier et al., Phys. Rev. B 93, 075412 (2016)

## **Propagation of a nanosecond pulsed discharge in ambient air at atmospheric pressure along thin film and nanostructured surface**

T. Darny, D. Babonneau, S. Camelio, F. Pailloux, \*D. Z. Pai

*Institut PPRIME (CNRS UPR 3346, Université de Poitiers, ISAE-ENSMA), Chasseneuil,  
France*

...

*\*david.pai@univ-poitiers.fr*

In this work, we have studied the plasma propagation in surface dielectric barrier discharge (SDBD) configuration in ambient air with specific multilayer materials. A silicon wafer covered by a silica layer (1 $\mu$ m thick) is first used as a propagation surface. The plasma is generated on the dielectric part of the surface, with a tungsten electrode touching the silica layer. Positive nanosecond voltage pulses with a low repetition rate (50 Hz) are used. The plasma is studied with fast ICCD imaging (PIMAX 4), time and space-resolved emission spectroscopy and current measurements. The surfaces are analyzed by space resolved Raman spectroscopy before and after plasma exposure. Single discharge events are visualized using a dedicated UV microscopy bench. Compared to a bulk material surface (glass) in exactly the same operating conditions, it first appears that this multilayer material has a strong influence on the plasma features. Instead of transient filaments more and less randomly distributed on the glass surface, the plasma exhibits a well-defined symmetric ring pattern, without any filaments. The ring pattern gradually expands on the surface during the positive voltage pulse and demonstrates high pulse-to-pulse reproducibility and stability.

When additional layers are deposited on the silica layer, the plasma still propagates with this stable ring structure. With an additional layer of nanodiamond (300 nm thick), the plasma propagation distance and velocity are increased. Furthermore, the high pulse-to-pulse reproducibility of the ring plasma pattern results in local surface modification.

This multilayer approach may offer potential perspectives for a better control of the plasma generated in air at atmospheric pressure in a SDBD configuration.

## Croissance Vapeur-Liquide-Solide des Nanofils GaAs : Rôle de l'interface Ga / SiO<sub>2</sub>

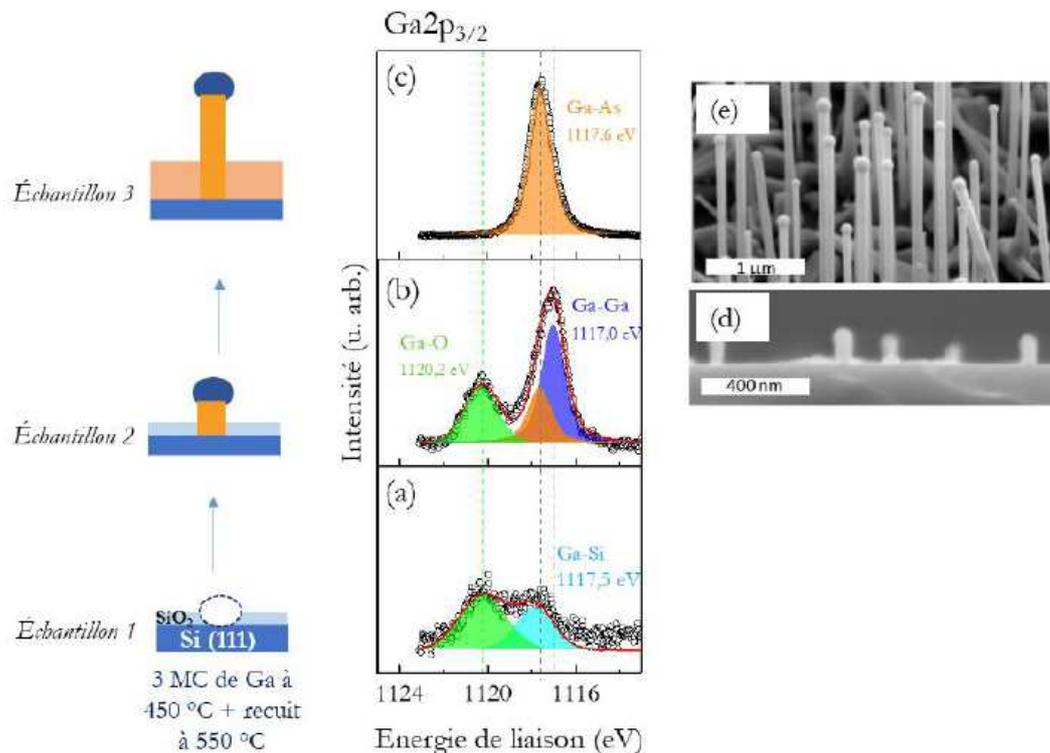
<sup>1</sup>L. Fouquat, <sup>1</sup>J. Penuelas, <sup>1</sup>T. Dursap, <sup>2</sup>M. Silly, <sup>1,\*</sup>G. Grenet

1 - Université de Lyon, INL-UMR5270, Ecole Centrale de Lyon, Ecully.

2 - Synchrotron Soleil, L'orme des Merisier, Saint Aubin.

\*e-mail: genevieve.grenet@ec-lyon.fr

Les nanofils (NFs) de semiconducteurs III-V sont actuellement intensément étudiés pour leurs propriétés électroniques, optiques et mécaniques. Les NFs GaAs sont typiquement crus par la méthode Vapeur-Solide-Liquide (VLS) par épitaxie par jets moléculaires (MBE). Même si l'or est le catalyseur le plus commun, pour la croissance de nanofils GaAs, l'utilisation de gallium comme catalyseur s'impose pour préserver la qualité optoélectronique. Le processus typique de croissance autocatalysée par VLS est en trois étapes. 1) du Ga est déposé sur un substrat pour former des nano-gouttes. Ces nano-gouttes doivent être en contact avec le substrat cristallin pour permettre la croissance épitaxiée. 2) l'échantillon est porté à la température de croissance. 3) la croissance des nanofils est faite. En 2008, le groupe de Fontcuberta a montré que la croissance des nanofils de GaAs par autocatalyse est facilitée par la présence d'une couche de silice. C'est le rôle de cette couche de silice que nous avons étudié par photoémission dans ce travail.



[1] Fontcuberta I Morral A., Colombo C., Abstreiter G., Arbiol J. & Morante *Appl. Phys. Letters*, 92 (2008).

[2] Colombo C., Spirkoska D., Frimmer M., Abstreiter G. & Fontcuberta I, Morral A. *PRB* 77 , 2-6 (2008).

## **Formation de nanocristaux de SiP<sub>2</sub> dans des films minces d'oxydes de silicium SiO<sub>1.5</sub> riches en phosphore**

<sup>1</sup> S. Geiskopf, <sup>1\*</sup> M. Stoffel, <sup>1</sup> X. Devaux, <sup>2</sup> E. André, <sup>2</sup> C. Carteret,  
<sup>1</sup> A. Bouché, <sup>1</sup> M. Vergnat, <sup>1</sup> H. Rinnert

*1 - Université de Lorraine, CNRS, Institut Jean Lamour, 54000 Nancy, France*

*2 - Université de Lorraine, UMR CNRS 7564, LCPME, 405 rue de Vandœuvre,  
54600 Villers-lès-Nancy, France*

...

*\*e-mail: mathieu.stoffel@univ-lorraine.fr*

Les nanocristaux à base de Si (NC-Si) insérés dans une matrice diélectrique ont fait l'objet de très nombreuses études durant ces vingt dernières années du fait de leurs propriétés électroniques et optiques originales. De nouvelles fonctionnalités peuvent être attendues s'il est possible de doper ces nanocristaux. Des études théoriques et expérimentales ont montré la possibilité de doper des NC-Si avec du bore (B) ou du phosphore (P). Toutefois, la localisation exacte des dopants et la concentration maximale possible restent encore des questions ouvertes.

Dans ce travail, nous étudions les propriétés structurales et optiques de couches minces de SiO<sub>1.5</sub> riches en phosphore. Elles sont obtenues par co-évaporation sous vide de SiO, de SiO<sub>2</sub> et de phosphore provenant d'une cellule à décomposition de GaP. Les propriétés structurales et optiques ont été étudiées par microscopie électronique en transmission à balayage (STEM), spectroscopies infrarouge et Raman. Pour des concentrations en phosphore supérieures à 3 at.%, les caractérisations microstructurales mettent en évidence deux types de nano-objets. D'une part, nous observons la formation d'excroissances à l'interface film/substrat en épitaxie avec le substrat de Si. D'autre part, les films minces contiennent des nanoparticules quasi-sphériques de SiP<sub>2</sub> cristallisant dans une structure orthorhombique. Leur taille croît de 15 à 35 nm lorsque la teneur en phosphore augmente de 3 à 10 at.%. L'analyse dispersive en énergie montre que les excroissances contiennent jusque 1 % de P. Par ailleurs, la stoechiométrie des nanoparticules est compatible avec le composé SiP<sub>2</sub>. La cartographie chimique obtenue par spectroscopie de perte d'énergie a permis de préciser la localisation de chaque élément présent dans nos films. Enfin, les données Raman combinées avec des simulations numériques réalisées en DFT ont permis de donner une première caractérisation spectroscopique des nanoparticules de SiP<sub>2</sub>.

## Propriétés optiques de surfaces de silicium cristallin fonctionnalisées par des terres rares

<sup>1,2,3\*</sup>K. Toussaint, <sup>2</sup>C. Cadiou, <sup>4</sup>B. K. Bahuleyan, <sup>2</sup>F. Chuburu, <sup>1</sup>T. Easwarakhanthan, <sup>1</sup>A. Bouché, <sup>3</sup>M. Molinari et <sup>1</sup>H. Rinnert

*1- Institut Jean Lamour, Univ. Lorraine, Nancy, France*

*2 - Institut de Chimie Moléculaire de Reims, Univ. Reims Champagne-Ardenne, Reims, France*

*3 - Laboratoire de Recherche en Nanosciences (EA 4682), Univ. Reims Champagne-Ardenne, Reims, France*

*4- Department of General Studies, Royal Commission: Yanbu Industrial College (RCYCI), P.O. Box 30436, Saudi Arabia.*

*\*e-mail: kathleen.toussaint@univ-lorraine.fr*

En raison de son gap indirect, le silicium cristallin est un mauvais émetteur de lumière. Obtenir des propriétés optiques à partir de ce matériau, notamment d'émission, est un challenge et un enjeu très important pour l'industrie de l'optoélectronique et pour les télécommunications optiques. Le confinement quantique de porteurs de charge dans des nanostructures de silicium a permis d'obtenir une émission radiative à température ambiante mais qui reste trop peu efficace et l'injection électrique dans les matériaux nanostructurés est complexe. Une alternative est de donner des propriétés d'émission optique au silicium en lui associant des ions émetteurs de lumière. Sa surface peut être modifiée afin de la rendre optiquement active. Dans ce travail, des complexes contenant des éléments luminescents comme les terres rares, ont été greffés sur la surface du silicium. Ces derniers sont très intéressants en optique car ils présentent des raies d'émission à des longueurs d'ondes qui ne sont que peu modifiées par leur environnement [1,2,3].

Pour fixer ces complexes de lanthanides à la surface du silicium il est nécessaire d'oxyder celle-ci afin qu'elle présente des groupements réactifs à sa surface (silanols). Une deuxième étape est alors nécessaire : ajouter un aminosilane ((3-aminopropyl)triéthoxysilane ou APTES) qui fera le lien entre le complexe et la surface de silice [4,5]. La fonction silane permet le greffage à la silice et le film formé présente des fonctions amines libres (-NH<sub>2</sub>) qui peuvent réagir avec une fonction acide carboxylique. Il est ensuite nécessaire "d'emprisonner" les ions de lanthanides dans l'acide 1,4,7,10-tetraazacyclododecane-1-glutarique-4,7,10-triacétique (DOTAGA) [6,7]. Celui-ci présente 4 fonctions acides carboxyliques pouvant complexer l'ion terre rare. Une 5<sup>ème</sup> fonction acide carboxylique reste libre et peut interagir avec une fonction amine ce qui permet une fixation covalente du complexe.

Les complexes de lanthanides (Tb, Eu, Ce, Yb et Nd) ainsi formés sont optiquement actifs. Il est montré qu'une fois greffés sur le film mince, les complexes à base de Tb, Eu et Ce présentent une luminescence importante alors que ceux à base d'Yb et de Nd sont peu optiquement actifs. De plus, l'effet de l'environnement sur ces molécules a été étudié et sera présenté.

[1] Koen Binnemans. Lanthanide-Based Luminescent Hybrid Materials. Chemical Reviews, 109(9) :4283–4374, September 2009.

[2] Ana de Bettencourt-Dias, editor. Luminescence of lanthanide ions in coordination compounds and nanomaterials. Wiley, Chichester, West Sussex, United Kingdom, 2014.

[3] Svetlana V. Eliseeva and Jean-Claude G. Bünzli. Lanthanide luminescence for functional materials and bio-sciences. Chem. Soc. Rev., 39(1) :189–227, 2010.

- [4] Joonyeong Kim, Paul Seidler, Lai Sze Wan, and Catherine Fill. Formation, structure, and reactivity of amino-terminated organic films on silicon substrates. *Journal of Colloid and Interface Science*, 329(1) :114–119, January 2009.
- [5] Robert M. Pasternack, Sandrine Rivillon Amy, and Yves J. Chabal. Attachment of 3-(Aminopropyl)triethoxysilane on Silicon Oxide Surfaces : Dependence on Solution Temperature. *Langmuir*, 24(22) :12963–12971, November 2008.
- [6] Natarajan Raghunand, Gerald P. Guntle, Vijay Gokhale, Gary S. Nichol, Eugene A. Mash, and Bhumasamudram Jagadish. Design, Synthesis, and Evaluation of 1,4,7,10-Tetraazacyclododecane-1,4,7-triacetic Acid Derived, Redox-Sensitive Contrast Agents for Magnetic Resonance Imaging. *Journal of Medicinal Chemistry*, 53(18) :6747–6757, September 2010.
- [7] Jörg Henig, Éva Tóth, Jörn Engelmann, Sven Gottschalk, and Hermann A. Mayer. Macrocyclic Gd<sup>3+</sup> Chelates Attached to a Silsesquioxane Core as Potential Magnetic Resonance Imaging Contrast Agents : Synthesis, Physicochemical Characterization, and Stability Studies. *Inorganic Chemistry*, 49(13) :6124–6138, July 2010.

## Étude de la surface (100) de l'alliage métallique complexe Ce<sub>3</sub>Pd<sub>20</sub>Si<sub>6</sub>.

<sup>1</sup>F. Abdel-hamid, <sup>1</sup>M.C. de Weerd, <sup>1</sup>J. Ledieu, <sup>1</sup>É. Gaudry, <sup>1</sup>V. Fournée.

*Institut Jean Lamour, UMR 7198 CNRS - Université de Lorraine, Campus ARTEM - 2 allée  
André Guinier, BP 50840, F-54011 NANCY*

*\*Email : firas.abdel-hamid@univ-lorraine.fr, vincent.fournee@univ-lorraine.fr*

Les intermétalliques sont des composés définis formés par au moins deux métaux distincts et dont la structure diffère de celles des éléments purs qui les constituent. Les alliages métalliques complexes (CMAs : Complex Metallic Alloys) sont des intermétalliques dont la maille unitaire contient un grand nombre d'atomes, allant de quelques dizaines jusqu'à plusieurs milliers d'atomes [1] qui s'arrangent généralement sous forme d'agrégats de haute symétrie. Les quasicristaux, de structure aperiodique [2] et leurs approximants périodiques sont des exemples de CMAs, ainsi que les composés cages comme les skutterudites et les clathrates [3]. Les CMAs présentent des propriétés de surface intéressantes, comme une bonne résistance à la corrosion, une faible adhésion et de faibles coefficients de frottement. Plusieurs d'entre eux sont également des matériaux prometteurs comme catalyseurs [4].

De nombreuses études traitent des propriétés de volume des composés cages. Cependant, la structures de leurs surfaces sont moins bien connues. Dans cette étude, on s'intéresse au composé Ce<sub>3</sub>Pd<sub>20</sub>Si<sub>6</sub> [5] qui est un clathrate de type I cubique, de paramètre de maille  $a=12.161 \text{ \AA}$  et contenant 116 atomes répartis en 12 Ce, 80 Pd et 24 Si. Dans la maille, on trouve deux cages formées par les atomes Pd et Si et centrées sur par un atome Ce. L'une est formée par 16 Pd et l'autre par 12 Pd et 6 Si.

Un échantillon monocristallin a été élaboré au sein de l'équipe par la méthode de Czochralski et coupé ensuite perpendiculairement à la direction [100]. Nous présenterons les premiers résultats d'une étude de la surface (100) de ce composé utilisant différentes méthodes d'analyses structurales incluant la microscopie à effet tunnel (STM), la diffraction d'électrons lents (LEED), les spectroscopies de photoélectron (XPS/UPS) et la spectroscopie tunnel (STS). Des calculs *ab initio* basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) sont utilisés comme un outil complémentaire afin d'évaluer les énergies de surface de différents modèles structuraux cohérents aux observations expérimentales. Les différents résultats issus de l'expérience et du calcul sont discutés.

---

[1] Complex Metallic Alloys: Fundamentals and Applications, edited by J.-M. Dubois and E. Belin-Ferré (Wiley-VCH, Weinheim, 2011).

[2] W. Steurer, Z. Kristallogr., 219 (2004) 391.

[3] P. Rogl, in Thermoelectrics Handbook, Macro to Nano, CRC Press, Section 32-1 (2006) 24.

[4] J.-M. Dubois, Chem.Soc. Rev.41 (2012) 6760.

[5] Yu.D. Seropegina, A.V. Gribanova, O.L. Kubareva, A.I. Tursina, O.I. Bodakb, Journal of Alloys and Compounds 317–318 (2001) 320–323.

## **Toward optimum N<sub>2</sub> plasma nitriding processes for GaAs(100) surface passivation**

<sup>1</sup>C. Robert-Goumet, <sup>1</sup>G. Monier, <sup>1</sup>L. Bideux, <sup>1</sup>P. E. Hoggan,  
<sup>1</sup>F. Reveret, <sup>1</sup>Joel Leymarie,  
<sup>1,2</sup>H. Mehdi, <sup>2</sup>M. A. Mahjoub, <sup>2</sup>B. Pelissier

*1- Institut Pascal, UMR CNRS 6602, Université Clermont Auvergne,  
Clermont-Ferrand, France*

*2 - LTM, CNRS, Université Grenoble Alpes, Minatec campus, Grenoble, France*

*\*e-mail: christine.robert-goumet@uca.fr*

The high density of interface states that cause the strong Fermi pinning observed at GaAs surface is reduced by the growth of a passivating GaN thin film using N<sub>2</sub> plasma irradiation. To further develop this passivation, it is necessary to investigate the nitridation phenomena by identifying the different steps occurring during the self-limited process and to understand surface organization depending on the nitridation conditions. AR-XPS measurements were carried out to identify the chemical environments and compositional profiles of atoms. In addition, LEED patterns show a switch between cubic and hexagonal reconstruction of the GaN surface when nitrogen ions are favored by radical atoms in the N<sub>2</sub> plasma. These results allow us to optimize the process parameters in order to obtain the best surface passivation against air exposure. This optimization was demonstrated using micro-photoluminescence.

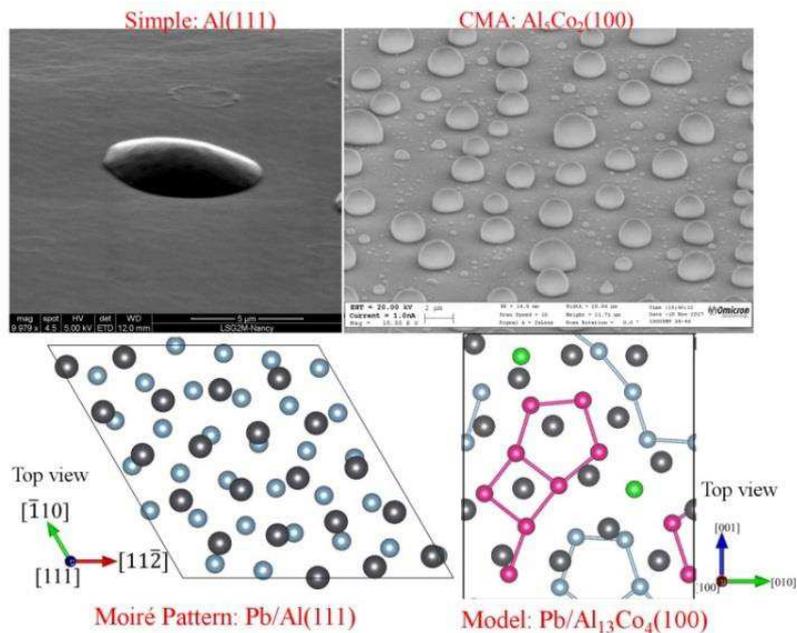
## Liquid Pb droplets probing intrinsic wetting properties of Al(111) and low index surfaces of Al-based complex intermetallics

<sup>1\*</sup>Kanika Anand, <sup>1</sup>Julian Ledieu, <sup>1</sup>Vincent Fournée, <sup>1</sup>Émilie Gaudry

<sup>1</sup>- IJL, UMR 7198 CNRS-Université de Lorraine, 54011 Nancy, France.

\*e-mail: kanika.anand@univ-lorraine.fr

Sub-micronic liquid Pb droplets can be formed on atomically flat and clean metal surfaces by dewetting Pb thin films deposited under ultra-high vacuum conditions. The contact angles of these droplets depend on both the substrate surface energy versus the one of the probe metal (Pb) and the interfacial energy at the Pb/substrate interface through the Young-Dupré equation. Experimental results are found to be extremely different (Fig.), whether the droplets are formed on a pure fcc Al(111) surface or on the (100) surface of the  $\text{Al}_{13}\text{Co}_4$  intermetallic compound, which actually consists in almost pure Al planes albeit with a different crystallographic and electronic structures [1]. To gain a better understanding of these phenomena, ab initio calculations of the Pb/Al(111) and Pb/ $\text{Al}_{13}\text{Co}_4$ (100) interfacial energies have been performed. The contact angle calculated for Pb/Al(111), taking into account the moiré structure observed experimentally, is in good agreement with the experimental one (exp. :  $27.3^\circ \pm 0.8^\circ$  [2] and calc. :  $34.4^\circ$ ). Corresponding electronic structure calculations show a weak interaction between the Pb film and the Al substrate. A stronger interaction is highlighted for Pb/ $\text{Al}_{13}\text{Co}_4$ (100). Thus a larger interfacial energy is expected, leading to an increase of the contact angle, as observed experimentally.



**Fig. - Top:** SEM images of Pb droplets on Al(111) and  $\text{Al}_5\text{Co}_2$ (001) surfaces. **Bottom:** surface models showing Pb monolayers on Al(111) and  $\text{Al}_{13}\text{Co}_4$ (100) surfaces

[1] É. Gaudry, et al. "Structure of the  $\text{Al}_{13}\text{Co}_4$ (100) surface: Combination of surface x-ray diffraction and ab initio calculations", *Physical Review B* **94** 165406 (2016).

[2] T. Deniozou, et al. "Aperiodic and modulated Pb thin films on fivefold icosahedral Al-Cu-Fe and Al (111): Tailoring the structure of Pb", *Physical Review B* **79** 245405 (2009).

## Imaging and probing local energy band alignments of organic/inorganic interfaces by Ballistic Electron Emission Microscopy (BEEM)

<sup>1</sup> A. Junay, <sup>1</sup> S. Guézo, <sup>1</sup> P. Turban, <sup>1</sup> B. Lépine, <sup>1</sup> G. Delhaye, <sup>1</sup> S. Tricot, <sup>1</sup> S. Ababou-Girard and <sup>1</sup> Francine Solal

*1- Institut de Physique de Rennes, Département Matériaux-Nanosciences, UMR 6251, Université de Rennes 1, CNRS, 263 avenue du Général Leclerc, 35042 Rennes cedex, France*

*\*e-mail: sophie.guezo@univ-rennes1.fr*

In molecular electronics, the control of organic/inorganic interfaces is crucial to understand the properties of formed devices. By studying the structure and the transport properties of hybrid organic-inorganic heterostructures, we report on the potentialities of Ballistic Electron Emission Microscopy (BEEM, derived from the Scanning Tunneling Microscopy one) to image the local hot-electron transmission of interfaces (imaging mode) and to quantitatively characterize the local electronic properties of interfaces at the nanometer scale (spectroscopy mode) [1]. In order to minimize the degree of metal penetration through the organic layer and obtain homogeneous heterojunctions, an alternative top-contact deposition method is used, based on Buffer-Layer Assisted Growth (BLAG) [2,3]. The extension of this work to the case of OML/ferromagnets spinterfaces is in progress.

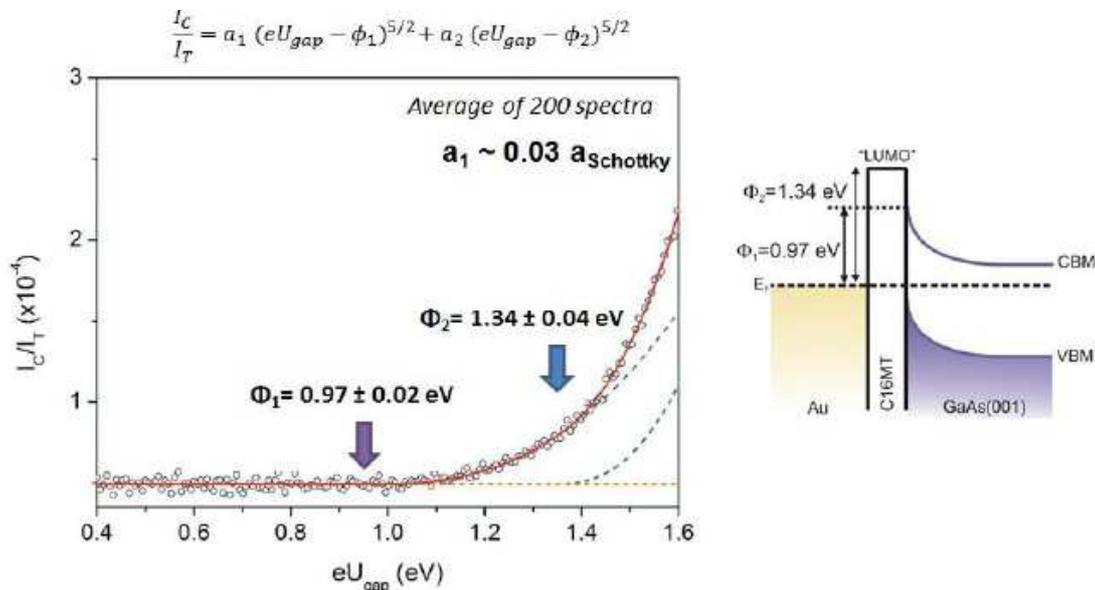


Figure: BEEM spectroscopy on Au(BLAG)/C16MT/GaAs(001) (left) and corresponding local band alignment (right)

- [1] A. Junay, S. Guézo, *et al.*, *Journal of Applied Physics*, **118**, 085310 (2015).  
 [2] M. M. Maitani, D. L. Allara, *et al.*, *Applied Physics Letters*, **96**, 173109-3 (2010).  
 [3] A. Junay, S. Guézo, *et al.*, *The Journal of Physical Chemistry C*, **120**, 24056 (2016)

## **Etude de l'adsorption de la molécule organique TBB (1, 3, 5-tri (4-bromophényle benzène)) sur la surface Si(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ - R30°B**

<sup>1</sup>\*N. Shaiek, <sup>1</sup>C. Lamine, <sup>1</sup>S. Menzli, <sup>1</sup>A. Akremi

*1- Faculté des sciences de Bizerte, Université de Carthage, Laboratoire de Physique des Matériaux : Structure et propriétés, Unité de service commun « Spectromètre de surfaces » Bizerte, Tunisie.*

*\*Nesrineshaiek.phy@gmail.com*

La croissance de TBB [1] sur la surface Si(111)- $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ - R30°B a été réalisée moyennant les techniques d'analyses de surface in-situ : la spectroscopie de photoémission des rayons X (XPS), la diffraction des électrons lents (LEED) et la spectroscopie des photoélectrons ultraviolets (UPS).

L'étude par LEED montre une reconstruction  $3\sqrt{3}\times 3\sqrt{3}$ - R30° présente même après de fortes doses (20MC). L'analyse par XPS montre par déconvolution des pics des niveaux de cœur la présence des différentes liaisons chimiques C-C, C-H et C-Br vérifiant la stoechiométrie dans la molécule. La couche adsorbée présente une stabilité dans le réarrangement et la réactivité à 10<sup>-9</sup> mbar même après plusieurs jours.

L'étude par UPS révèle la présence de bandes d'états proches du niveau de Fermi caractéristiques de la molécule en particulier les états HOMO. L'évolution de ces états ainsi que celle du travail de sortie est évaluée au cours de la croissance.

[1] B. Baris, F. Palmino, "Noncovalent Bicomponent Self Assemblies on a Silicon Surface", American Chemical Society, **6(8)** (2012) 6905–6911.

## **Tailoring Electronic Properties In Long Range Ordered on Surface Synthetized Polymer**

S. Xing<sup>1</sup>, Y. Fagot-Revurat<sup>1</sup>, G.Vasseur<sup>1</sup>, G. Kremer<sup>1</sup>, M. Sicot<sup>1</sup>, B. Kierren<sup>1</sup>, D.Malterre<sup>1</sup>, G. Galeotti<sup>2</sup>, J. Lipton-Duffin<sup>2</sup>, L. Cardenas<sup>2</sup>, F.Rosei<sup>2</sup>, M. Di Giovannantonio<sup>3</sup>, G. Contini<sup>3</sup>, P. Le Fevre<sup>4</sup>, F. Bertran<sup>4</sup>, J. Rault<sup>4</sup>, V. Meunier<sup>5</sup>, L. Liang<sup>5</sup>, D. Perepichka<sup>6</sup>, A. Verdini<sup>7</sup>, A. Cossaro<sup>7</sup>

*1 - Institut Jean Lamour, Université de Lorraine - CNRS, Vandoeuvre-les-Nancy (France)*

*2 - Institut National de la Recherche Scientifique, Varennes (Canada)*

*3 - Istituto di Struttura della Materia, CNR, Roma (Italy)*

*4 - Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Saint-Aubin (France)*

*5 - Rensselaer Polytechnic Institute, New York, (United States)*

*6 - McGill University, Montreal (Canada)*

*7 - ELETTRA synchrotrone, Trieste (Italy)*

*\*e-mail: yannick.fagot@univ-lorraine.fr*

Polymerization on surfaces has been widely studied during the last two decades. The most successful method to obtain ordered polymers is based on the Ullmann reaction: noble surfaces act as catalysts and templates for polymerization. We succeed to form a well ordered commensurate polymeric phase from di-Bromobenzene (dBB) deposited on Cu(110) and annealed above the polymerization temperature [1-3]. We evidenced how crucial is the polymer/substrate interaction for the electronic properties [4]. We studied the Br-I substitution by growing dIB/Cu(110) and show that iodine adsorption site and PPP orientation differ in such a way that electronic properties are strongly affected [5,6]. Finally we were able to synthetize infinite PPP polymers on copper vicinal surfaces [6].

[1] M. Di Giovannantonio et al. , ACS Nano 7, 8190 (2013); [2] M. Di Giovannantonio et al. , J. Am. Chem. Soc., 138 (51), 16696–(2016): [3] G. Galeotti et al., submitted to Small (2019); [4] G. Vasseur et al. , Nat. Comm. 7, 10235 (2016) and SOLEIL Highlights 2016, Surfaces, Interfaces and Nanosystems, p 20/21; [5] G.Galeotti et al., Faraday Discuss. 204, 453 (2017); [6] S. Xing et al., preprint (2019).

## Electronic interaction between organic molecules and nitrogen doped graphene

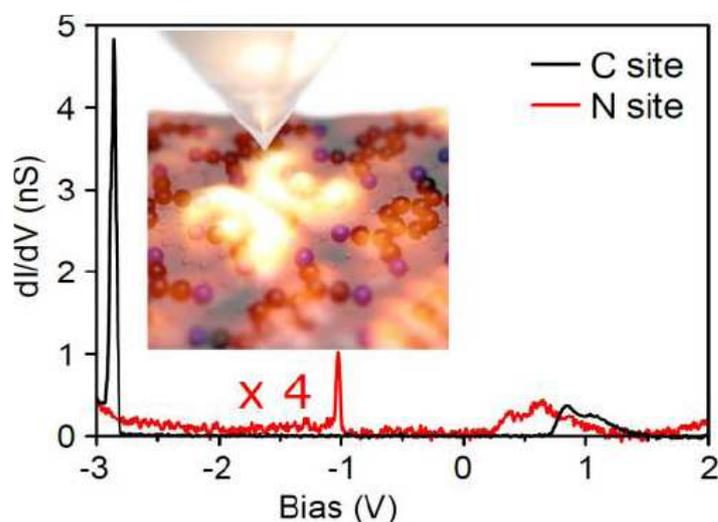
<sup>1</sup> V. D. Pham, <sup>2</sup> F. Joucken, <sup>1</sup> C. Chacon, <sup>1</sup> Y. Girard, <sup>1</sup> V. Repain, <sup>1</sup> A. Bellec, <sup>2</sup> R. Sporken, <sup>1</sup> S. Rousset and <sup>1</sup> J. Lagoute

1- *Laboratoire Matériaux et Phénomènes Quantiques (MPQ), CNRS, Université Paris Diderot, Paris, France*

2 - *Laboratoire Physique de la matière et du rayonnement, Université de Namur, 61 Rue de Bruxelles, 5000 Namur, Belgium*

\*e-mail: [jerome.lagoute@univ-paris-diderot.fr](mailto:jerome.lagoute@univ-paris-diderot.fr)

Tailoring the properties of graphene is of fundamental interest to uncover new functionalities and open new opportunities for graphene based applications. In this context, substitutional doping and molecular functionalization have focused tremendous efforts. Nitrogen doping obtained by replacing some carbon atoms by nitrogen atoms appears to be particularly interesting as it allows to perform n-doping with minor structural perturbations. This chemical doping can also modify the interaction of graphene with organic molecules that can be exploited for sensing or catalysis. To probe this effect at the molecular level, scanning tunneling microscopy and spectroscopy experiments have been performed on molecules adsorbed on multilayer pristine and doped graphene on SiC(000-1). Local spectroscopy allows to reveal the electronic coupling between molecules and graphene. On doped graphene, a local modification of the charge transfer between molecules and graphene occurs at the doping sites. The electric field induced by the STM tip also lead to a modification of this charge transfer that can be combined with the effect of nitrogen doping [1] (see figure).



*Spectroscopy of TCNQ molecules on nitrogen doped graphene*

### Reference :

[1] V. D. Pham et al., npj 2D Materials and Applications (2019)

## Liste des participants

Abdel Hamid	Firas	firas.abdel-hamid@univ-lorraine.fr
Akremit	Abdelwahab	a_akremit@yahoo.fr
Anand	Kanika	kanika.anand@univ-lorraine.fr
Andreazza	Pascal	Pascal.Andreazza@univ-orleans.fr
Andrieu	Stephane	stephane.andrieu@univ-lorraine.fr
Babonneau	David	david.babonneau@univ-poitiers.fr
Bea	Hélène	helene.bea@cea.fr
Ben Azzouz	Chiraz	benazzouzchiraz@yahoo.fr
Bulou	Herve	herve.bulou@ipcms.unistra.fr
Carrado	Adele	adele.carrado@ipcms.unistra.fr
Carretero-Genevri	Adrien	carretero@ies.univ-montp2.fr
Chatelier	Corentin	corentin.chatelier@univ-lorraine.fr
Cheynis	Fabien	cheynis@cinam.univ-mrs.fr
Coati	Alessandro	coati@synchrotron-soleil.fr
Cobian	Manuel	manuel.cobian@ec-lyon.fr
Combe	Nicolas	combe@cemes.fr
Croes	Boris	croes@cinam.univ-mrs.fr
Croset	Bernard	bernard.croset@insp.jussieu.fr
Dargaud	Valentin	valentin.dargaud@axesstech.fr
Deleuze	Pierre Marie	pierre-marie.deleuze@u-bourgogne.fr
Domenichini	Bruno	bruno.domenichini@ubfc.fr
Dubaux	Dominique	dominique.dubaux@univ-lorraine.fr
Dursap	Thomas	thomas.dursap@master.ec-lyon.fr
Duval	Jessica	j.duval@scientec.fr
Ettema	Ad	Ad.ETTEMA@scintaomicron.com
Fagot-Revurat	Yannick	yannick.fagot@univ-lorraine.fr
faiza	bouchala	faiza_82@hotmail.com
Fournée	Vincent	vincent.fournee@univ-lorraine.fr
Garreau	Yves	yves.garreau@synchrotron-soleil.fr
Garrillo	Pablo	Pablo.Garrillo@scintaomicron.com
Gaudry	Emilie	emilie.gaudry@univ-lorraine.fr
Gauthier	Sebastien	gauthier@cemes.fr
Gomez	Ana Cristina	ana-cristina.gomez-herrero@neel.cnrs.fr
Goyhenex	Christine	Christine.Goyhenex@ipcms.unistra.fr
Guézo	Sophie	sophie.guezo@univ-rennes1.fr
Hahn	Raphaël	raphael.hahn@u-psud.fr
Hijazi	Hadi	hadi.hijazi@uca.fr
Jeridi	Hayfa	hayfa.jeridi@insp.jussieu.fr
Kierren	Bertrand	bertrand.kierren@univ-lorraine.fr
Lagoute	Jérôme	jerome.lagoute@univ-paris-diderot.fr
Lazzari	Rémi	lazzari@insp.jussieu.fr
Le Moal	Eric	eric.le-moal@u-psud.fr

Ledieu	Julian	julian.ledieu@univ-lorraine.fr
Lepleux	Emmanuel	e.lepleux@scientec.fr
Leroy	Frédéric	leroy@cinam.univ-mrs.fr
Loppacher Voirol	Christian	christian.loppacher@im2np.fr
Lueken	Karen	karen.lueken@specs.com
Mauchamp	Vincent	vincent.mauchamp@univ-poitiers.fr
Muller	Pierre	muller@cinam.univ-mrs.fr
Pauly	Nicolas	nipauly@ulb.ac.be
Pellerin	Didier	d.pellerin@scientec.fr
Penuelas	José	jose.penuelas@ec-lyon.fr
Pierron	Thomas	thomas.pierron@univ-lorraine.fr
Pierucci	Debora	dpierucci@cells.es
Prévot	Geoffroy	prevot@insp.jussieu.fr
Puibasset	Joel	puibasset@cnrs-orleans.fr
Purbawati	Anike	anike.purbawati@neel.cnrs.fr
Renault	Olivier	olivier.renault@cea.fr
Richard	Marie Ingrid	marie-ingrid.richard@im2np.fr
Robert-Goumet	Christine	christine.robert-goumet@uca.fr
Ruano Merchán	Catalina	catalina.ruano-merchan@univ-lorraine.fr
Saint-Jalmes	Arnaud	arnaud.saint-jalmes@univ-rennes1.fr
Shaiek	Nesrine	nesrineshaiek.phy@gmail.com
Sicot	Muriel	muriel.sicot@univ-lorraine.fr
Sinturel	Christophe	christophe.sinturel@univ-orleans.fr
Socaciu-Siebert	Liana	liana.socaciu-siebert@specs.com
Sonnet	philippe	philippe.sonnet@uha.fr
Stoffel	Mathieu	mathieu.stoffel@univ-lorraine.fr
Stomp	Romain	romains@zhinst.com
Tajouri	Tahar	tajourit2001@yahoo.fr
Toussaint	Kathleen	kathleen.toussaint@univ-lorraine.fr
Viguié	Claude	veronique.metteey@axesstech.fr
Xing	Sarah	sarah.xing@cryoscan-uhv.com
zhang	kai	zhang@insp.jussieu.fr



**PROGRAMME JSI 2019**

	<b>Mercredi 23</b>		<b>Jeudi 24</b>		<b>Vendredi 25</b>	
Heure		Heure		Heure		
09:00		09:00	Rémi Lazzari (INSP)	09:00	Hélène Bea (SPINTEC - CEA)	
	JSE	09:45	Adrien Carretero (IES)	09:45	Marie Ingrid Richard (IM2NP)	
		10:30	Pause café	10:30	Pause café	
		11:00	Debora Pieruci (ALBA)	11:00	Eric Le Moal (ISMO)	
		11:45	Vincent Mauchamp (Institut P')	11:45	Fabien CHEYNIIS (CINAM)	
11H45	Accueil et buffet de bienvenue	12:30	REPAS	12:30	REPAS	
13:45	Ouverture					
14:00	Julian Ledieu (JUL)	14:00	Muriel Sicot (JUL)			
14:45	Christine Goyhenex (IPCMS)	14:45	Sébastien Gauthier (CEMES)			
15:30	Pause café	15:30	Christian Lopacher (IM2NP)			
16:00	Adèle Carado (IPCMS)	16:15	Session Posters			
16:45	Christophe Sinturel (ICMN)					
17:30	Arnaud Saint Jalmes (IPR)					
		20:00	DINER DE GALA			