

# Master thesis proposal

**Title:** Effets de charge et d'arrangement cristallin sur les mesures de photoémission : le cas de l'oxyde d'aluminium (Stage Expérimental + traitement de données)

**Keywords:** XPS, matériaux, oxydes, data processing

## Scientific description:

La spectroscopie de photoélectrons induits par rayons X (XPS) est devenue une technique d'analyse chimique de surface incontournable, tant au sein de laboratoires académiques que dans l'industrie, dans des domaines aussi variés que l'énergie, les micro- et nanotechnologies, la catalyse. Elle apporte des informations cruciales dans la compréhension de systèmes complexes essentiellement au travers des déplacements chimiques des pics de niveaux de cœur. Cependant, l'obtention d'une analyse XPS fiable reste un défi majeur pour les matériaux isolants ou faiblement conducteurs. En effet, l'effet photoélectrique laisse une charge positive à la surface dont l'écrantage dépend de la conductance du matériau analysé. Cette charge de surface doit être « neutralisée » au risque de décaler et/ou déformer le signal recueilli par l'analyseur, et de conduire à une interprétation erronée des résultats. Bien que ces effets de distorsion des signaux dans les matériaux isolants soient connus depuis les débuts de l'XPS, peu d'études ont examiné de façon systématique l'influence de paramètres clés sur la forme des signaux. Parmi ces facteurs, citons la forme cristalline du matériau, la taille des grains, la source de rayons X (AlK $\alpha$ , AgK $\alpha$  et CrK $\alpha$ , monochromatée ou non), mais surtout le système de neutralisation mis en œuvre pendant la mesure.

Dans le cadre de la Fédération de Recherche "**Spectroscopies de Photoémission**" (FR2050 CNRS) et en particulier de la commission "**Méthodologies - Fiabilité des données**", des mesures inter-laboratoires sont menées pour comparer les performances des différents appareillages disponibles en France et trouver une méthode de traitement commune des données pour une caractérisation XPS fiable de matériaux difficiles à analyser. Dans le cadre de ce stage, nous souhaitons étudier un isolant modèle : l'oxyde d'aluminium.

**1- Caractérisation du matériau standard :** La première partie du stage concernera l'analyse comparative d'oxydes d'aluminium sous différentes formes (poudre, film mince, monocristal). Une attention particulière portera sur les effets de charge et l'efficacité de la neutralisation utilisée sur les différents appareillages disponibles au sein de la FR. Les effets seront estimés pour la position, la forme et la largeur à mi-hauteur des photo-pics. Le montage des échantillons et la préparation des poudres feront l'objet d'une attention particulière. Selon l'avancée des travaux, des mesures à différentes profondeurs (variation de l'angle d'émergence des photoélectrons et/ou modification de l'énergie des photons X) pourront être réalisées et venir compléter les travaux du groupe de travail "Interfaces Enfouies" de la FR.

**2- Exploitation des données :** Les données issues de tous les laboratoires seront traitées et comparées. A cette occasion, l'étudiant-e devra se rendre dans certains laboratoires en France pour faire le lien entre les différentes façons de travailler et extraire un mode opératoire commun à la fois pour l'acquisition et le traitement des données.

**Techniques/methods in use:** XPS, calcul, exploitation de données, traitement de données

**Applicant skills:** En formation dans un master relié à la chimie des matériaux, à la physico-chimie et/ou la caractérisation des surfaces, l'étudiant-e devra réaliser la synthèse de l'ensemble des résultats obtenus dans ce stage en les reliant aux différents modes de travail en photoémission à l'échelle nationale. Elle-Il devra faire preuve à la fois d'un goût pour le travail expérimental, d'un intérêt pour les techniques d'analyse de surface, d'une grande rigueur scientifique, d'une ouverture d'esprit nécessaire à une telle étude entre laboratoires ainsi que d'une capacité de synthèse et de communication.

**Industrial partnership:** Non

**Internship supervisor(s)** (name, email, phone, ...):

Stéphane Guilet, stephane.guilet@insp.jussieu.fr, 0624294717

au nom du Groupe de Travail « Méthodologies et Fiabilité des données » de la Fédération de Recherche FR SPE CNRS n°2050.

**Internship location:** INSP, Equipe Oxydes en basse dimensions.

**Possibility for a Doctoral thesis:** Yes (sujet commun à plus de dix laboratoires français)