

Sujet de Thèse

Modélisation de la croissance d'un nano-alliage sous contrainte élastique.

Responsables de thèse : Jean-Noël Aqua et Thomas Frisch

jnaqua@ec-marseille.fr 04 91 28 87 25

thomas.frisch@im2np.fr 04 91 28 87 26

La manipulation et l'observation de la matière à l'échelle de l'atome ouvre un champ nouveau de recherches et d'applications industrielles. En particulier, l'élaboration de composants à base de cristaux semiconducteurs ordonnés aux échelles nanométriques [1] a permis des avancées spectaculaires en optoélectronique pour la réalisation de diodes et de lasers dans des gammes de fréquences nouvelles et en microélectronique pour le stockage optimal d'informations.

Suivant les conditions de réalisation, on peut fabriquer des puits, boîtes, fils quantiques, ou autres architectures dont la composition atomique a des conséquences cruciales pour les applications potentielles. Un des procédés expérimentaux utilisés pour réaliser des boîtes quantiques consiste à faire croître un alliage par déposition atomique et à obtenir des structures organisées, notamment sur des systèmes soumis à une contrainte élastique.

Le sujet proposé concerne la modélisation et l'étude de la composition atomique de films et d'îlots résultant d'une croissance sous contrainte élastique.

En effet, les formes cristallines, tant à l'échelle macroscopique que nanométrique, résultent de la dynamique de croissance. Dans de nombreux systèmes expérimentaux, au moins deux espèces d'atomes sont présentes. La cinétique de croissance (ségrégation, diffusion de surface différentielle, etc.) peut alors induire des inhomogénéités des profils de composition qui peuvent influencer en retour la croissance.

Le(a) candidat(e) étudiera donc le couplage entre les champs élastiques à longue portée et les inhomogénéités de composition, et son influence sur l'évolution de la morphologie du film [2]. Il s'agira dans un premier temps de développer un modèle prédictif de la croissance basé sur une description des champs élastiques issue des milieux continus [2,3] en incorporant l'interdiffusion dans la description théorique.

L'analyse linéaire permettra dans un premier temps de déterminer les paramètres (flux, température, coefficient de diffusion, composition, paramètres de maille) fixant les longueurs d'onde et les variations de composition. Afin de décrire l'évolution sur des temps longs, il s'agira ensuite de procéder à l'analyse non-linéaire du modèle et d'étudier le couplage entre l'instabilité de composition et l'instabilité morphologique (ex. Fig 1). Les outils qui seront utilisés sont à la fois analytiques (analyse de stabilité, etc.) et numériques (méthode spectrale [3]). Le(a) candidat(e) pourra aussi utiliser l'outil des simulations numériques atomistique de type Monte-Carlo cinétique [4] qui pourront compléter l'approche théorique.

Le(a) candidat(e) développera tout d'abord un cadre d'analyse concernant les systèmes modèles de type Si/Ge. Dans un deuxième temps, la comparaison sera faite avec la croissance de semiconducteurs III-V, comme InGaN et AlGaIn, qui peuvent impliquer d'autres mécanismes.

Cette étude théorique permettra de guider les expériences de microscopie à haute résolution et de rayons X qui prévoient d'analyser les profils de croissance d'échantillons Silicium/Germanium [5] et plus généralement sur des systèmes III/V à gap direct. De plus nous utiliserons les modèles de types écoulement de marches que nous avons développées dans notre laboratoire au cours des années précédentes [6,7] pour permettre des approches complémentaires.

- [1] A. Pimpinelli, J. Villain, Physics of crystal growth (1998).
- [2] B. J. Spencer, P. W. Voorhees, J. Tersoff, Phys. Rev. B, 64, 235318 (2001).
- [3] J.-N. Aqua, T. Frisch, A. Verga, Phys. Rev. B, 76, 165319 (2007).
- [4] J.-N. Aqua, T. Frisch, Phys. Rev. B, 78, 121305 (2008).
- [5] I. Berbezier, A. Ronda, J. Phys Cond. Matt., 14, 8283 (2002).
- [6] T. Frisch, A. Verga, Phys. Rev. Lett, 94, 226102, (2005)
- [7] T. Frisch, A. Verga, Phys. Rev. Lett, 96, 166104, (2008).

IM2NP

UMR 6242 CNRS – Universités d'Aix-Marseille Paul Cézanne, Provence et Sud Toulon Var

Faculté des Sciences et Techniques de Saint-Jérôme - Case 142

Avenue Escadrille Normandie Niemen

13397 Marseille Cedex 20

France

tel. +33 (0) 491 288 313

fax +33 (0) 491 288 775

email : direction@im2np.fr

