

Titre de la thèse :

**Modélisation des effets de l'hydrogène sur la morphogenèse des nanostructures de silicium hydrogéné dans un réacteur plasma.**

Date de Soutenance : 20/01/06

Obtenu avec la mention : Félicitation du jury

Résumé de la thèse :

Cet ouvrage s'inscrit dans le but de comprendre les mécanismes liés à la morphogenèse des nanostructures de silicium hydrogéné dans un réacteur plasma par des techniques de modélisation. Dans un premier temps les technologies actuelles sont passées en revue afin de répondre aux attentes actuelles qui leurs sont propres. Vient ensuite un rappel des possibilités d'étude qui sont utilisables dans ce contexte particulier.

Les différentes techniques qui permettent de simuler les trajectoires des atomes par dynamique moléculaire sont rappelées. Les méthodes quantiques de calcul de potentiel d'interaction entre les espèces chimiques sont ensuite développées pour conclure que seules des méthodes quantiques semi-empiriques sont suffisamment rapides pour pouvoir implémenter un algorithme de dynamique moléculaire quantique sur des échelles de temps raisonnables.

A partir des outils introduits, une réflexion sur la nature des états moléculaires énergétiquement métastables est présentée sur un cas théorique de croissance auto-organisée d'une chaîne linéaire d'atomes. Ce modèle qui consiste à faire croître une chaîne par l'ajout successif de l'atome qui augmente le moins l'énergie électronique de la chaîne montre que le niveau de Fermi est un paramètre essentiel à l'auto-organisation de la croissance. Ce modèle montre aussi que la structure formée n'est pas forcément une structure de minimum global d'énergie.

A partir de tous ces outils numériques, la croissance d'agrégats moléculaire peut être simulée en utilisant comme paramètres les données issues de calculs de magnéto-hydrodynamique des conditions régnant au sein des réacteurs plasma (concentration des espèces, intervalle de temps entre les réactions chimiques, énergie d'impact des réactifs...). La formation d'agrégats de silicium hydrogéné est ainsi simulée par captures successives de molécules de silane. Les structures formées en simulation aux températures de fonctionnement des réacteurs plasma prédisent la formation d'agrégats sphériques constitués d'un coeur de silicium amorphe recouvert par de l'hydrogène. Ces structures ne sont donc pas dans un état de minimum d'énergie contrairement à certains résultats expérimentaux. Ces résultats ont cependant été obtenus sans la prise en compte de la présence d'hydrogène atomique dans le plasma.

Une étude approfondie de l'effet de l'hydrogène atomique sur les structures métastables produites en simulation est donc effectuée. L'étude de l'interaction de l'hydrogène atomique sur la surface de l'agrégat permet de trouver des proportions de mécanismes (désorption d'hydrogène de type Eley-Rideal, atome chaud ou adsorption sur la surface de l'agrégat) en accord avec des expériences de recombinaison sur des surfaces de silicium. Les interactions de l'hydrogène atomique avec la surface des agrégats induisent aussi une modification de l'organisation interne des atomes de silicium. L'organisation des atomes de silicium interne à agrégats en fonction de la taille de l'agrégat (nombre magique) permet de comprendre pourquoi les observations expérimentales indiquent la présence de structures cristallines. Enfin cette étude mène à la prédiction d'une structure particulièrement stable qui pourrait servir de germe de croissance pour les nanofils de silicium.

## JURY :

### Pascal Le Flock

DHCP : Laboratoire Hétéroéléments et Coordination (UMR7653)

Ecole Polytechnique

91128 Palaiseau Cedex

Tel : 33 1 69 33 45 70

Fax : 33 1 69 33 39 90

e-mail : lefloch@poly.polytechnique.fr

### Khaled Hassouni

LIMPH : Laboratoire d'Ingénierie des Matériaux et des Hautes Pression (UPR1311)

Université Paris Nord

99 avenue Jean Baptiste CLEMENT

93430 VILLETANEUSE

Tel : 33 1 49 40 34 11

Fax : 33 1 49 40 34 14

e-mail : hassouni@limhp.univ-paris13.fr

### Leanne C. Pitchford

CPAT : Centre de Physique des Plasmas et Applications de Toulouse (UMR5002)

Université Paul Sabatier

118 route de Narbonne

31062 Toulouse Cedex, FRANCE

Tel : 33 5 61 55 64 81

Fax : 33 5 61 55 63 32

e-mail : pitchford@cpat.ups-tlse.fr

## RAPPORTEURS :

### Laifa Boufendi

GREMI : Groupe de recherches sur l'énergétique des milieux ionisés (UMR6606)

Université d'Orléans

14 rue d'Issoudun

B.P. 6744

45067 ORLEANS Cedex 2

Tel : 33 2 38 49 48 73

Fax : 33 2 38 41 71 54

e-mail : Laifa.Boufendi@univ-orleans.fr

### Benoit Soep

LFP : Laboratoire Francis PERRIN (URA2453)

bat 522

CEA Saclay

91191 GIF SUR YVETTE

Tel : 33 1 69 08 65 51

Fax : 33 1 69 08 84 46

e-mail : bsoep@cea.fr