

## **Observations virtuelles d'hétérostructures semiconductrices pour mieux appréhender les états de contrainte locaux.**

**Sujet de thèse proposé par Marie-Jo Casanove ([casanove@cemes.fr](mailto:casanove@cemes.fr)) et Anne Ponchet ([ponchet@cemes.fr](mailto:ponchet@cemes.fr))**

CEMES-CNRS, 29 rue Jeanne Marvig, Toulouse, équipe MC2

Les contraintes mécaniques résultent des processus physiques d'élaboration permettant d'obtenir des matériaux cristallins structurés : épitaxie avec désaccord paramétrique, implantation, nitruration.... Les contraintes d'épitaxie en particulier sont maintenant totalement intégrées dans la conception des dispositifs. La (méta)stabilité des structures épitaxiées contraintes est particulièrement complexe car des mécanismes de relaxation de contraintes s'ajoutent aux problèmes plus généraux de la croissance. La réalisation d'une hétérostructure est donc extrêmement dépendante des conditions de croissance : celles-ci peuvent modifier de façon importante les modes de croissance (2D ou 3D), la structure des interfaces (type de liaison), la qualité des interfaces (rugosité, interdiffusion...), l'apparition de dislocations d'interface, etc. Les propriétés physiques des structures en sont directement affectées.

Connaître l'état de contrainte d'un système est donc essentiel pour la maîtrise de la chaîne conception-élaboration-propriétés. Cette connaissance implique bien évidemment de recueillir des informations fiables via différentes techniques expérimentales et cela à toutes les échelles pertinentes aux propriétés qui en découlent. De ce point de vue, la microscopie électronique en transmission (MET) est une technique de choix permettant d'obtenir des informations très locales à la fois dans l'espace direct et dans l'espace réciproque. Elle devient particulièrement pertinente si l'on sait combiner plusieurs approches complémentaires, typiquement l'imagerie haute résolution (MEHR), la méthode de la courbure (observations MET conventionnel) et la diffraction en faisceau convergent (CBED).

Dans le cadre du travail de thèse proposé, nous nous attacherons plus précisément aux notions de fiabilité et de sensibilité des techniques mises en œuvre. Cela implique de développer des modèles d'échantillons auxquels nous ferons « subir » des effets de relaxation au travers d'étapes virtuelles de préparation pour les observations MET avant de simuler les observations MET proprement dites. Cette modélisation est aujourd'hui impérative si l'on veut atteindre une réelle description des états de contrainte locaux dans les hétérostructures qui, loin de se limiter à une valeur moyenne, intègrera la nécessaire existence des interfaces, et des gradients éventuels dans les barrières comme dans les puits. Un échantillon virtuel peut être décrit par différents paramètres comme la direction d'observation, l'orientation cristallographique, la forme et l'épaisseur de la lame, sa fixation, ses propriétés mécaniques en surface....

Comme tous les échantillons de MET subissent des effets de relaxation de surface (ils sont en effet systématiquement amincis pour devenir transparent aux électrons), les échantillons modèles doivent pouvoir subir des relaxations, qui de plus tiennent compte de l'anisotropie cristalline. La technique de modélisation adéquate est la méthode des éléments finis. Les échantillons une fois relaxés seront décrits sous forme de champ de déformation 3D ou 2D. Une étape cruciale sera ensuite la simulation des images MET à partir de ces modèles afin de comparer expérience et simulation .

On utilisera dans ce travail de thèse des matériaux « modèles », du type couches quantiques de GaInAs sur GaAs ou InP, pour développer le protocole de mesure, tant d'un point de vue expérimental que pour les simulations. Cependant, ce travail s'insère dans un cadre plus large incluant à la fois des études expérimentales sur les matériaux les plus innovants pour l'optoélectronique comme les lasers à cascade quantique et des approches atomistiques pour la simulation des interfaces.