

# Modèles de croissance de couches minces

*Alain Dollet*

*Procédés Matériaux et Energie Solaire (PROMES) - CNRS,  
Tecnosud, Rambla de la thermodynamique, 66100 Perpignan Cedex, France  
& Four Solaire d'Odeillo, BP5 Odeillo, 66125 Font Romeu, France.*

Le dépôt d'un film mince à partir d'un plasma froid réactif met en jeu de nombreux phénomènes physiques et chimiques, fortement couplés. La microstructure de la couche déposée résulte principalement des interactions complexes entre les espèces gazeuses et la surface du substrat ou du film en croissance. La mise au point d'un modèle capable de simuler convenablement la dynamique d'évolution de la microstructure de couches déposées par plasma est une tâche particulièrement difficile.

Nous décrivons tout d'abord brièvement les phénomènes physiques en jeu aux interfaces gaz-solide, avant de présenter le principe des différents types de modèles qui peuvent être utilisés pour simuler la croissance de couches. Les modèles de dynamique moléculaire basés sur des potentiels d'interactions empiriques ou ab initio permettent une description très fine des interactions gaz-surface mais sur des échelles spatio-temporelles restreintes. Ces modèles utilisent peu ou pas d'hypothèses simplificatrices et permettent de prédire l'évolution de la microstructure des films à l'échelle atomique. Des modèles de nature continue, tels que les modèles de suivi d'interface, courbes de niveau, ou encore des modèles géométriques de croissance de grains, permettent de simuler l'évolution de la topographie de surface aux échelles micro et macroscopiques. Avec ce type de modèle, il est possible de simuler complètement la croissance d'un film, mais les interactions gaz-surface ne sont décrites que très grossièrement tout comme la microstructure résultante. Entre ces 2 catégories de modèles, les modèles Monte Carlo Cinétiques offrent un excellent compromis pour la simulation de croissance de couches. En utilisant ces modèles basés sur un nombre raisonnable d'hypothèses simplificatrices, il est en effet possible de simuler assez finement la microstructure des films déposés, et ce sur des échelles spatio-temporelles relativement importantes. Nous décrivons tout particulièrement ce dernier type de modèles.

Plusieurs exemples de modèles de simulation de croissance de couches, issus de nos propres travaux et de la littérature, seront ensuite présentés. L'intérêt et le potentiel prédictif des différents types de modèles pour le cas du dépôt par plasma froid seront discutés. La mise en œuvre des modèles de croissance dans des stratégies de simulation multiéchelles sera finalement évoquée et illustrée. La problématique du couplage des modèles de croissance avec des modèles de transfert couplés et des modèles ab initio sera alors abordée.