

# " Chimie, Physique et Rayonnement / Matériaux, Magnétisme et Physique du Solide"

## **Titre : CPR24 Croissance des films minces : modélisation multi-niveaux, élaboration et caractérisation expérimentales**

### **Organisateurs :**

- MASTAIL Cédric (Institut PPrime, Poitiers)
- HEMERYCK Anne (LAAS-CNRS, Toulouse)
- FILLON Amélie (ISCR/CM, INSA Rennes)
- VIZZINI Sébastien (IM2NP, Aix-Marseille)

### **Parrainage ou lien avec des sociétés savantes, des GDR ou autres structures :**

**GDR ModMat, GDR PULSE, ANR INTEGRAL**

### **Résumé**

Les films minces font partie des éléments incontournables du monde industriel de par leur omniprésence dans la plupart des dispositifs technologiques manufacturés aujourd'hui. Les films minces sont souvent utilisés pour optimiser les caractéristiques des dispositifs fonctionnels pour des applications dans des domaines aussi diversifiés que l'optique (revêtements anti-réflexion, cellules photovoltaïques, revêtements miroirs), la micro/optoélectronique (condensateurs, capteurs piézoélectriques, revêtements anti-statiques, résistances, transistors, diodes), le magnétisme (disque dur, mémoire vive), la mécanique (basse friction, adhésion, revêtements durcissant), la chimie (barrière anti-diffusion, protection anti-corrosion), le médical (capteurs, revêtements d'implants), la bijouterie-horlogerie (revêtements colorés)... Les propriétés fonctionnelles des films minces sont étroitement liées à la composition, la dimension finie des couches, la microstructure, la taille des grains, la stabilisation de phases métastables, au niveau de contraintes... L'optimisation des propriétés des films minces passe par la maîtrise de la croissance qui nécessite une bonne compréhension de l'interdépendance entre les paramètres de dépôt, les mécanismes de croissance mis en jeu, la micro-structuration qui en résulte et les propriétés physico-chimiques des films.

Les approches multi-échelles sont de plus en plus utilisées pour comprendre et maîtriser les processus spécifiques de la croissance de couches minces épitaxiées ou non. Ces approches reposent sur l'utilisation conjointe de plusieurs méthodes dites classiques pour investiguer le film mince sous plusieurs échelles spatiales (atomique à macroscopique) et/ou temporelles. Avec le développement concomitant des techniques d'élaboration (contrôle des paramètres expérimentaux, des épaisseurs) et les progrès sur les analyses structurales (sensibilité plus fine) et sur les analyses par simulations numériques, la compréhension des mécanismes atomistiques au cours de la croissance suscite un vif intérêt. Parmi les approches basées sur la modélisation numérique, les méthodes Monte-Carlo cinétique sont particulièrement adaptées. Elles permettent de simuler la croissance de films minces, depuis l'échelle atomique jusqu'à l'échelle mésoscopique, et ainsi mettre en exergue les relations complexes entre mécanismes, procédé de croissance et propriétés du film. On peut citer aussi les méthodes couplant la DFT à la MD pour investiguer les joints de grain et les défauts. D'un point de vue expérimental, les techniques de caractérisations structurales *in operando* et en *temps réel* (caractérisation optique, résistivité électrique, DRX, GISAXS, courbure du substrat,...) couplées à des analyses microstructurales *ex situ* (spectroscopie, diffraction et diffusion des rayons X ou des électrons, AFM, etc) sont également bien appropriées pour étudier des phénomènes aussi dynamiques que ceux de la croissance dont les mécanismes spécifiques restent encore parfois mal identifiés et controversés.

Le but de ce mini colloque est de réunir les différents acteurs scientifiques de la communauté s'intéressant à la croissance des films minces (métallique, semi-conducteur, etc...) par des approches multi-échelles, que ces approches soient centrées sur la simulation numérique, l'expérience ou un couplage des deux. Il sera ainsi possible de réaliser un état de l'art, mais également de faire le point sur les développements méthodologiques les plus récents dans ce domaine.

Le Comité organisateur décernera également un prix au meilleur poster présenté durant ce mini-colloque