

Sujet de thèse entre le CRHEA (Sophia Antipolis) et le CEA-LETI (Grenoble)

2021-2024

Modélisation et caractérisation des effets de nano-compliance pour la croissance épitaxiale localisée de GaN sur substrats Si.

Beaucoup des applications en opto- et micro-électronique sont tributaires de la qualité structurale des matériaux utilisés. Plus spécifiquement, les couches actives des dispositifs sont déposées sur un substrat, qui sert de base à la croissance épitaxiale. Si le substrat est de nature cristalline différente de celle des couches qui y seront épitaxiées, des défauts tels que des dislocations sont créés. Pour pallier ce problème, dans le cas qui nous intéresse des nitrures d'éléments III de la famille du composé GaN, des méthodes d'épitaxie dite localisée sont utilisées qui reposent sur la croissance de germes cristallins périodiquement répartis sur la surface du substrat. La croissance latérale à partir de ces germes permet de courber les dislocations dans le plan de croissance, limitant ainsi leur propagation vers les zones actives de l'empilement épitaxié (puits quantiques/gaz d'électrons, etc). Cependant, des défauts apparaissent à la coalescence de ces germes en raison de la désorientation relative qu'ils présentent entre eux. Ce problème limite l'utilisation courante de ces méthodes de réduction des densités de défauts.

La méthode que nous proposons repose sur une structuration spécifique du substrat Si sous forme de nanopiliers déformables. Ceci permet aux cristallites qui y croissent, de s'aligner parfaitement cristallographiquement au moment de la coalescence, donc sans créer de défauts, compensant ainsi naturellement les désorientations entre cristallites. Il s'agit d'une méthode originale d'épitaxie compliant, dite de Nano-Pendeo Epitaxie. Nous avons pu ainsi démontrer que la densité de dislocations obtenue dans des couches de GaN déposées sur un réseau périodique de tels nano-piliers est 10 fois plus faible que celle communément obtenue par croissance directe sur substrat Si, avec encore un fort potentiel d'amélioration. Si le réseau est de taille finie (nxm nano-piliers), ceci ouvre la voie à l'obtention de « vignettes » de GaN de dimensions allant du μm à une fraction de mm compatibles avec de multiples applications en optoélectronique, comme les $\mu\text{-LEDs}$ pour écrans haute résolution/forte brillance. Un autre avantage de la méthode provient de la délamination facile des « vignettes » obtenues, simplifiant grandement les procédés technologiques de fabrication des $\mu\text{-LEDs}$: ceci provient de la fissuration des nano-piliers à la descente en température. Mais pour tirer parti de ce procédé, il est important de pouvoir le contrôler.

La thèse que nous proposons a pour objectif de modéliser les phénomènes thermo-mécaniques en jeu dans ce procédé de croissance épitaxiale localisée et notamment la fissuration des nano-piliers. Cette modélisation devra en retour nous permettre de mieux dimensionner les réseaux de piliers (nature des matériaux dans les piliers, diamètre, période, agencement) ou d'envisager des structurations spécifiques qui permettraient d'éviter toute coalescence simultanée pour diminuer encore la densité de dislocations. Du point de vue mécanique, ce système est composé d'un assemblage de plusieurs matériaux. Ces matériaux, avec des propriétés mécaniques et thermiques différentes, introduisent des concentrations de contraintes lorsque le système est soumis à des variations de température. En jouant avec la géométrie et la distribution spatiale des nano-piliers, il est donc possible de contrôler la raideur de ces nano-piliers. On pourra ainsi les rendre souples à haute température pour permettre l'alignement cristallographique des cristallites. Ou bien de les fissurer lors de la descente en température grâce au contraste de propriétés thermo-mécaniques entre les différents matériaux du système. Pour ce faire, on utilisera des modèles numériques basés sur la méthode des éléments finis de façon à prédire le comportement mécanique de ces systèmes complexes.

Pour mieux cibler les données d'entrée des modèles, et pour permettre de mieux dimensionner les structurations, une partie complémentaire du travail de thèse concernera la caractérisation de la structure des cristallites et vignettes obtenues. Ceci nous ouvrira à une meilleure compréhension des phénomènes en jeu. En particulier, nous mettrons en œuvre des méthodes de mesure des orientations locales à l'échelle nanométrique, telles que l'EBS (Electron BackScattered Diffraction), pour suivre l'évolution des désorientations entre cristallites avant et après coalescence. Nous étudierons la répartition et l'évolution des contraintes, également à l'échelle nanométrique, dans les cristallites et dans les « vignettes » coalescées. La Microscopie Electronique en Transmission (TEM) et les techniques telles que la Cathodo-Luminescence (CL) et l'ECCI (Electron Channeling Contrast Imaging) nous donneront des informations précieuses sur le type de défauts et leur répartition dans les cristallites et vignettes.

Ce travail de thèse rentre dans le cadre d'un projet ANR intitulé PEGADIS démarrant début 2021 et qui fédère quatre laboratoires : le CNRS / LTM pour le développement des procédés de structuration des nanopiliers, le CNRS / CRHEA où s'effectue la croissance épitaxiale sur ces nano-piliers, le CEMEF/Mines ParisTech en charge de la modélisation et le CEA / LETI pour la caractérisation et des développements technologiques pour les μ -LEDs. Au-delà du développement d'un procédé novateur de croissance conforme, l'objectif final de ce projet est de démontrer son applicabilité pour le développement d'une filière nouvelle de μ -LEDs pour les écrans haute résolution.

Le candidat / la candidate devra être issu(e) d'une formation M2 ou dernière année d'école d'ingénieurs. Une connaissance des outils de simulation et une formation à la physique du solide, si possible du semi-conducteur, sera appréciée. Il ou elle sera en contact très fréquent avec les autres membres du projet et devra donc posséder de bonnes facultés de communication et de reporting. Le travail sera effectué au CEMEF à Sophia Antipolis pour la partie modélisation et principalement au CEA / LETI à Grenoble pour la partie caractérisation. Le sujet fait appel à de fortes interactions avec les autres partenaires du projet mais aussi avec des partenaires académiques extérieurs en ce qui concerne les moyens poussés de caractérisation.

Abstract

In order to decrease the dislocation density induced by the different crystalline structures between the nitride semiconductor layers and the Si substrates they are grown onto, one often uses localised epitaxy methods. However, these result in the formation of other defects arising between the adjacent nucleation centers. We have developed an original localised epitaxy method by which the crystallites are deposited onto deformable nano-pilars, allowing these crystallites to join without creating any defect. The PhD work we propose aims at a better understanding, for a better control, of the mechanical and thermo-mechanical processes at play during this process of nano-pendecimic compliant epitaxy. This will be dealt with using finite element models so as to predict the mechanical behaviour of these complex nano-structured systems and by using an ensemble of structural nano-characterization tools for assessing the defect and strain distribution in the materials. From the reduction of defects in the epitaxial layers, we expect to address some of the main issues for a number of important applications related to these nitride materials in the opto- and micro-electronic domains

Contacts :

Guy Feuillet : guy.feUILlet@cea.fr

/ Jesus Zuniga Perez : Jesus.Zuniga.Perez@crhea.cnrs.fr

Patrice Gergaud : patrice.gergaud@cea.fr

/ Philippe Vennégues : Philippe.Vennegues@crhea.cnrs.fr