

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

UNIVERSITE SAAD DAHLEB DE BLIDA
البلدية- جامعة سعد دحلب

FACULTE DES SCIENCES
كلية العلوم

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE
دائرة الفيزياء

MEMOIRE DE MAGISTER

مذكرة الماجستير

Spécialité: Physique Appliquée
Option : Matériaux et composants

**MODELISATION ET SIMULATION, A L'ECHELLE ATOMIQUE,
DE LA CROISSANCE CRISTALLINE HOMOEPITAXIQUE
DE QUATRE COUCHES ATOMIQUES DE GaAs/GaAs(100) :
ETUDE DE LA DIFFUSION INTER ET INTRA-COUCHES**

Présenté par :

Ahleme MRAOUEFEL

Blida, Algérie
2002

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

UNIVERSITE SAAD DAHLEB DE BLIDA
البليدة- جامعة سعد دحلب

FACULTE DES SCIENCES
كلية العلوم
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE
دائرة الفيزياء

MEMOIRE DE MAGISTER

مذكرة الماجستير

Spécialité: Physique Appliquée
Option : Matériaux et composants

MODELISATION ET SIMULATION, A L'ECHELLE ATOMIQUE,
DE LA CROISSANCE CRISTALLINE HOMOEPITAXIQUE
DE QUATRE COUCHES ATOMIQUES DE GaAs/GaAs(100) :
ETUDE DE LA DIFFUSION INTER ET INTRA-COUCHES

Présenté par :

Ahleme MRAOUEFEL

Présenté devant le jury constitué de :

Mr. K. Ferdjani	MC Univ S.D. Blida	Président
Mr. A. Amrani	MC Univ. S.D. Blida	Rapporteur
Mr. M. Boumaour	MR U.D.T.S. Alger	Examineur
Mr. S. Bousbiat	MC E.N.S. Kouba Alger	Examineur
Mr. M. Derbal	CC Univ. S.D. Blida	Invité d'honneur
M ^{lle} A. Ali Messaoud	CC Univ. S.D. Blida	Co-promoteur

Blida, Algérie
2002



Dedicaces

A mes parents

En témoignage de mon amour et de ma reconnaissance

A mes frères et sœurs

En témoignage d'affection et de ma reconnaissance

A tous ceux qui mes sont chers.

Remerciements

Les travaux présentés dans cette thèse ont été effectués au laboratoire « *LASICOM* » (Laboratoire Surfaces, Interfaces et Couches Minces) à la faculté des Sciences, département de Physique en collaboration avec la faculté des sciences d'Ingénieurs, département d'Electronique sis à l'Université Saad Dehleb de Blida.

Je tiens à remercier vivement tous les membres du laboratoire « *LASICOM* » et surtout Monsieur K. Ferdjani, directeur de ce laboratoire ainsi que Monsieur R. Aïad, Monsieur A. Boumediene et Monsieur M. Derbal. Pour m'avoir accueilli dans ce laboratoire en m'encourageant continuellement dans mes travaux de recherche avec sympathie et modestie.

J'exprime ma profonde reconnaissance à M^r A. Amrani, mon Directeur de thèse et Maître de conférence à l'Université Saad Dehleb, pour m'avoir accordé sa confiance et m'avoir fait bénéficier de sa compétence, j'ai appréciée ses qualités professionnelles mais aussi humaines. Je lui exprime toute ma gratitude et tout mon estime.

Je suis très honorée de la présence à mon Jury :

M^r K. Ferdjani, Maître de conférence à l'Université Saad Dehleb, pour l'intérêt qu'il a porté à mon travail et d'avoir accepté de l'analyser en me faisant l'honneur de participer au Jury.

M^r S. Bousbiat, Maître de conférence à l'E.N.S de Kouba, pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de porté attention à mon travail et de faire parti du Jury.

Je suis très sensible du grand honneur que me fait M^r M. Boumaour, Maître de Recherche et Directeur de l'Unité de Développement de la Technologie du Silicium à Alger, qui malgré ses multiples taches et ses responsabilités a accepté de

participer au Jury de cette thèse. Je tiens à l'assurer de ma profonde et respectueuse gratitude.

Mes remerciement chaleureux vont aussi pour ma co-promoteur M^{elle} A. Ali Messaoud pour ces conseils et orientations qui ont été très bénéfiques.

Je suis également très honoré de la présence parmi les membres du Jury M^r M. Derbal, ex-Directeur de l'Institut des Sciences Exactes de l'Université de Blida, qu'il trouve ici mes remerciements pour sa disponibilité et pour m'avoir fait bénéficier de ses connaissances dans le domaine de la diffusion, pour mener à bien ce travail.

Mes remerciements se tournent aussi, avec adresse particulière, vers

- Professeur T. Kawamura du département de Physique à l'université Yamanashi, Japon.

- D^r. M. Djafari Rouhani, maitre de conférence à l'université Paul Sabatier de Toulouse.

pour leurs précieuses collaboration dans la mise à ma disposition de la documentation qui m'a été d'une grande aide.

J'exprime également ma profonde gratitude à Monsieur B. Chouikrate sous directeur chargé des études à l'institut vétérinaire de l'Université Saad Dahleb, pour avoir su me fournir une aide utile pour la rédaction de ce mémoire.

Enfin, j'exprime également ma profonde reconnaissance à tout mes collègues de laboratoire, et particulièrement à H. Lachenani, S. Ouir, A. Lachenani, S. Haireche, M. Elbaa et B. Boutahraoui, ainsi qu'à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à l'aboutissement de ce travail.

SOMMAIRE

Liste des figures

Liste des tableaux

INTRODUCTION GENERALE

Chapitre I : Rappel sur la croissance cristalline

INTRODUCTION.....	1
I HISTORIQUE DES MODELES DE SURFACE EN CROISSANCE CRISTALLINE.....	2
II LES MODELES TRADITIONNELS DE LA SIMULATION	2
II-1 Le modèle "Solid On Solid" de Kossel	2
II-2 Modèle de la réactivité moléculaire des surfaces : A.Madhukar.....	4
I-2-1 Mécanismes de croissance A.Madhukar et al	5
▪ Mécanismes RLI (Reaction limited Incorporation)	5
▪ Mécanismes CRLI (Configuration Limited Reactive Incorporation).....	6
III NECESSITE DE SIMULER.....	7
IV METHODES DE SIMULATION.....	8
IV-1 Les méthodes ab initio	9
IV-2 La dynamique moléculaire	9
IV-3 La technique de Monte Carlo	10
V LES MODELES ENERGETIQUES D'INTERACTIONS ATOMIQUES.....	10
V-1 Le modèle d'interaction de Champ de Force de Valence.....	11
VI CROISSANCE EPITAXIALE DES COUCHES MINCES	13
VI-1 Les principaux processus cinétiques	13
VI-2 Modes de croissance des couches minces.....	14
VI-3 Méthodes expérimentales pour la croissance epitaxiale.....	15
VI-3-1 Epitaxie par jet moléculaires.....	16
VI-3-2 Autres techniques de croissance concurrent la MBE	17

Chapitre II : Modélisation et Simulation de la Croissance Cristalline

INTRODUCT ION	19
I LA MODELISATION.....	19
I-1 base théorique et expérimentale de la modélisation.....	19
I-1-1 Choix du flux d'Arsenic	19
I-1-2 Choix de la surface de croissance.....	21
A/ La taille et l'orientation du substrat.....	21

Chapitre III : Résultats et Discussions

INTRODUCTION.....	54
I CONDITIONS ET PARAMETRES DE LA SIMULATION.....	54
II MISATION DES FLUCTUATIONS STATISTIQUES ASSOCIEE A LA SIMULATION DE MONTE CARLO.....	56
III ETUDE DE L'EVOLUTION DE LA COUVERTURE.....	58
III-1 Mécanisme de croissance.....	58
III-2- Effet de la température sur l'évolution des couvertures.....	62
III-3- Effet de l'intensité des flux incidents sur l'évolution des couvertures.....	64
IV ETUDE DE LA DIFFUSION DES ADATOMES DE GALLIUM AU COURS DE LA CROISSANCE GaAs/ GaAs (100).....	66
IV-1 Calcul de la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium.....	66
IV-2- L'évolution de la longueur moyenne de diffusion du Gallium au cours de la croissance.....	67
IV-3 L'effet de la température sur la longueur moyenne de diffusion.....	69
V ETUDE DU COEFFICIENT DE DIFFUSION DES ADATOMES DE GALLIUM...	71
V-1 Calcul du coefficient de diffusion des adatoms de Gallium.....	71
V-2 L'évolution du coefficient de diffusion du Gallium au cours de la croissance.....	72
V-3 L'effet de la température sur le coefficient de diffusion des atomes du Gallium.....	74
VI ANALYSE DE LA SURFACE.....	
VI-1 Analyse de la surface en terme de rugosité et de densité de marches.....	76
VI-1-1 Calcul de la Rugosité de la surface.....	76
VI-1-2 Calcul de la Densité de marches en surface.....	76
VI-1-3 Correspondance entre Rugosité de la surface Densité de marches en surface.....	77
VI-1-4 Correspondance entre Rugosité de la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium.....	77
VI-2 Analyse de la surface par la technique RHEED.....	78
VI-2-1 Etude cinétique de la croissance de quatre couches atomiques du système GaAs/ GaAs (100) par RHEED.....	80
VI-2-2 Calcul de l'intensité RHEED.....	80
VI-2-3 Variation des oscillations RHEED avec les conditions de croissance.....	82
VI-2-3-1 Effet de nombre de couches atomiques déposées sur le RHEED.....	82
VI-2-3-2 Effet de la température sur les oscillations RHEED.....	83
VI-2-3-3- Effet de la pression sur les oscillations RHEED.....	84
VII REPRESENTATION DE LA MORPHOLOGIE DE LA SURFACE.....	86
	88

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES.....	92
ANNEXES.....	94
BIBLIOGRAPHIE.....	102

Listes des figures

Fig. I-1 : Représentation schématique d'une surface construite par empilement d'atome Cubique, modèle S.O.S.	3
Fig. I.2 : Les configurations les plus probables pour un dépôt d'As ₂ selon A. Madhukar.	5
Fig. I-3 : Variation du taux de couverture en fonction du temps lors de la croissance du système GaAs/GaAs (100) :	6
(a) : Mécanisme de couverture RLI.	
(b) : Mécanisme de couverture CRLI.	
Fig. I-4 : Vitesse de croissance en fonction du temps pour un d'incorporation d'As ₂ [*] :	7
(a) faible, (b) élevé.	
Fig. I-5 : Hiérarchie des modèles pour l'étude des films minces. Les modèles sont classés suivant la taille des systèmes traités et les durées simulées typiques.	8
Fig. I-6 : Représentation schématique de différents processus impliqués dans la croissance des couches minces.	13
Fig. I-7 : Représentation schématique des trois modes de croissance.	14
Fig. I-8 : Bâti d'épitaxie par jet moléculaire, EJM, ou Molecular Beam Epitaxy, MBE.	16
Fig. II-1 : Schéma montrant la géométrie du système cellule- substrat dans le bâti de l'épitaxie par jet moléculaire.	20
Fig. II-2 : Variation de l'intensité des flux As ₂ et As ₄ désorbés en fonction de la température du substrat. Le flux incident est $J=10^{13}$ mol.cm ⁻² .	20
Fig. II-3 : Structure cristalline Zinc blende de GaAs	22
Fig. II-4 : Schéma montrant le repérage numérique des sites d'adsorption sur une surface de dimension (30 × 30) au cours de la croissance des quatre (04) couches monoatomiques de GaAs.	22
Fig. II-5 : Schéma montrant l'échantillonnage d'une surface infini.	23
Fig. II-6 : Conditions aux limites appliquées à la section I.	24
Fig. II-7 : Les deux configurations prises pour l'adsorption de As ₂ sur une surface de Gallium :	25
(a) : Configuration d'adsorption de la molécule As ₂ en une seule chaîne atomique.	
(b) : Configuration d'adsorption de la molécule As ₂ en deux chaînes atomiques.	
Fig. II-8 : Migration inter-couches au travers une marche.	27

Fig. II-9 : Les différentes possibilités de configurations Accrochées intervenant dans les diffusions inter-couches.	28
Fig. II-10 : Les événements probables intervenant dans le mécanisme de croissance	29
Fig. II-11 : Schéma illustrant les différents types d'évaporation de Gallium	31
Fig. II-12 : Schéma illustrant l'évaporation de l'Arsenic.	32
Fig. II-13 : Les quatre types de diffusions intra-couche.	33
Fig. II-14 : Représentation en 3D d'une diffusion inter-couche par saut de marches décomposé en deux (02) événements élémentaires.	34
Fig. II-15 : Les deux étapes d'un saut de marche.	34
Fig. II-16 : Schéma illustrant le passage d'un adatome d'un site vers un autre site.	38
Fig. II-17 : Etapes de calcul de l'énergie d'activation pour une diffusion à droite d'un adatome de Gallium.	39
Fig. II-18 : Etapes de calcul de l'énergie d'activation pour un passage d'une configuration Accrochée à une configuration Diédrique	40
Fig. II-19 : Test de l'uniformité des nombres aléatoires (tirage de $3 \cdot 10^6$ nombres).	42
Fig. II-20 : Les trois modules essentiels du simulateur	43
Fig. II-21 : Gestion des deux calendriers d'Arrivées Cal.Ga et Cal.As.	44
Fig. II-22 : Schéma illustrant un exemple pour déterminer des sites à probabilités modifiées Pour une diffusion droite : (a) : Configuration locale de surface à l'instant t_i avant la diffusion. (b) : Configuration locale de surface à l'instant t_{i+1} après la diffusion.	46
Fig. II-23 : Événements probables pour l'atome A.	47
Fig. II-24 : Diagramme illustrant les différentes communications entre les sous programmes et le programme principal.	49
Fig. II-25 : Organigramme de SimGas2.	52
Fig. III-1 : Evolution du taux de couverture pour $T=530^\circ\text{C}$ et un rapport de flux $\text{As}/\text{Ga} = 9$ le taux de couverture est tracé pour trois chemins aléatoires différents	57
Fig. III-2 : l'évolution théorique du taux de couverture pour $m=1$ et $m=3$ en fonction de temps (a) : Taux de couverture pour $m=1$. (b) : Taux de couverture pour $m=3$.	58

Fig. III-3 : Taux de couverture des couches de Ga et d'As en fonction du temps à T=570°C et pour un rapport de flux As/Ga=20.	59
Fig. III-4 : Les taux de recouvrements des couches de Ga et d'As en fonction du temps exprimé en unité de t_{ML} . Les chiffres impairs correspondent aux couches de Ga et chiffres pairs aux couches d'As (d'après [58]). Modèle CDRI $R_i \neq 0$ ($i=1,2,3,4$)	59
Fig. III-5 : Le taux de couverture des couches de Ga et d'As en fonction du temps (d'après [59]). Modèle CDRI ($R_1=R_2=0$).	61
Fig. III-6 : Le taux de couverture obtenu dans la première version de logiciel pour T=570°C et F As/ Ga=20.	61
Fig. III-7 : Taux de couverture obtenu pour différentes valeurs de températures et un rapport de flux F As/Ga=9.	62
Fig. III-8 : Effet de la température sur les diffusions inter-couches pour le Gallium et l'Arsenic (a): Les diffusions des couches supérieures vers les couches inférieures (b): Les diffusions des couches inférieures vers les couches supérieures	63
Fig. III-9 : Taux de couverture à une température T=530°C obtenu pour différentes intensités des flux : (a) : $J_{Ga} = 2.10^{+13}$ atome/cm ² .s correspondent à $\alpha_{Ga} = 10s^{-1}$ (b): $J_{Ga} = 2.10^{+14}$ atome/cm ² .s correspondent à $\alpha_{Ga} = 1s^{-1}$ (c): $J_{Ga} = 1.10^{+14}$ atome/cm ² .s correspondent à $\alpha_{Ga} = 0.5s^{-1}$	64
Fig. III-10 : Schéma montrant un exemple de trajet d'un adatome de Gallium passant du site (i) de la troisième couche vers le site (j) de la première couche	66
Fig. III-11 : La longueur de diffusion des adatoms de Gallium en fonction de temps de croissance (d'après [53]).	67
Fig. III-12 : Variation de la longueur moyenne de diffusion L_{moy} des adatoms de Ga en fonction du temps pour T=600°C et un rapport de flux As/Ga=2.	68
Fig. III-13 : Variation du nombre d'événement de diffusion pour chaque couche de Gallium en fonction de temps pour T=600°C et un rapport de flux As/Ga=2. 1 : est le numéro de la première couche atomique de GaAs(100). 3 : est le numéro de la troisième couche atomique de GaAs(100).	69
Fig. III-14 : La longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium en fonction de temps pour un rapport de flux As/Ga=20 et deux températures 580°C et 620°C.	70
Fig. III-15 : La variation de la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium obtenu par notre simulateur(LsimGaAs2) comparer au résultat de simulation de N. V. Peskov (Lpeskov).	71
Fig. III-16 : Variation du coefficient de diffusion D_{Ga} des adatoms de Ga en fonction du temps pour T=600°C et F As/Ga=2.	72

Fig. III-17 : Taux de couverture pour une température de 600°C et rapport de flux As/Ga égal 2.	73
Fig. III-18 : La variation du coefficient de diffusion des adatoms de Gallium en fonction de temps de croissance (d'après [53]).	74
Fig. III-19 : La variation du coefficient de diffusion des adatoms de Gallium dans la gamme de température [530°C – 620°C] D _{Ga} (SimGaAs2) : résultat obtenu par notre simulateur(SimGaAs2). D _{Ga} (Peskov) : résultat de simulation de N. V. Peskov [53].	74
Fig. III-20 : Diagramme d'Arrhenius de ln(D _{Ga}) en fonction de 1/T.	75
Fig. III-21 : Evolution de la Rugosité et de la Densité de marches en fonction du temps de croissance pour une température de T=580°C et un rapport de flux As/Ga=10.	77
Fig. III-22 : Evolution de la Rugosité et de la longueur moyenne de diffusion en fonction du temps de croissance pour T=620°C et un rapport de flux As/Ga=10	78
Fig. III-23 : Oscillations RHEED lors de la croissance de GaAs/ GaAs, avec récupération de l'intensité initiale à l'arrêt de la croissance.	80
Fig. III- 24 : Schématisation de la relation entre les oscillations RHEED et la morphologie de la surface.	81
Fig. III-25 : Variation de l'intensité RHEED en fonction du temps Pour T=600K et un rapport de flux As/Ga=1 d'après la première version du logiciel [34].	83
Fig. III-26 : Variation de l'intensité RHEED en fonction du temps Pour T=580°C et un rapport de flux As/Ga=1.	83
Fig. III-27 : Courbes correspondant aux oscillations RHEED prises pour deux températures de croissance 580°C et 620°C et un rapport de flux As/Ga=20.	84
Fig. III-28 : Nombre de diffusions en surface pour deux température : 580°C et 620°C et un rapport de flux As/Ga =20.	85
Fig. III-29 : Variation des oscillations RHEED en fonction du temps de croissance pour différentes valeurs de pression d'Arsenic obtenus à travers notre simulateur « SimGaAs2 »	86
Fig. III-30 : Variation des oscillations RHEED en fonction du temps de croissance pour différentes valeurs du pression : (A) : Les résultats expérimentaux [11][70][71]. (B) : Résultats de simulation du modèle CDRI de A. Madhukar et al [38]	87
Fig. III-31 : Représentation bidimensionnelle de la morphologie de la surface de GaAs de 30 ×30 sites entre 0.1 et 4 secondes. La température est de 620°C et le rapport des flux égal à 1.	89

Fig III-32 : Représentation bidimensionnelle de la morphologie de la surface de GaAs de 30×30 sites entre 0.1 et 4 secondes. La température est de 620°C et le rapport des flux égal à 10 .

Listes des Tableaux

Tab. I-1 : Formulation mathématique des différents types de l'énergie de contrainte.	17
Tab. II-1 : Configurations retenues de l'ancienne version du simulateur.	26
Tab. II-2 : Configurations supplémentaires de la nouvelle version du simulateur.	26
Tab. II-3 : Les différentes valeurs des énergies d'interactions utilisées dans plusieurs références.	36
Tab. III-1 : Les différentes énergies d'interaction entre l'Arsenic et le Gallium utilisées dans notre simulateur « SimGaAs2 ».	55
Tab. III-2 : Les fluctuations statistiques pour différentes tailles de substrat.	56
Tab. III-3 : Vitesses de croissance durant l'évolution uniforme et progressive de la couverture des couches pour différentes valeurs du flux et pour une température de croissance $T=530^{\circ}\text{C}$	65

Introduction Générale

INTRODUCTION GENERALE

Le développement de la microélectronique, dans la course vers la réduction des dimensions, ouvre la voie à de nouveaux axes de recherche, à tous les niveaux : de l'expérimentation, de la modélisation et de la simulation. Cette réduction des dimensions inhérente à l'accroissement de complexité, rend nécessaire l'analyse microscopique des phénomènes qui limitent les performances électriques et la fiabilité des réalisations : formation des défauts, diffusions anormale, contraintes ... Toutes les opérations fondamentales : oxydation, diffusion, implantation, recuit... sont concernées

Pour notre part, nous nous intéressons dans ce mémoire à la modélisation et à la simulation de la croissance cristalline. Nous tenterons de montrer que la simulation peut être un outil très efficace pour la compréhension des phénomènes nouveaux liés à la complexité croissante et à la taille de plus en plus petite des dispositifs électroniques et pour la prévision de leurs performances.

Dans ce manuscrit, nous présenterons les développements que nous avons effectués sur la première version du logiciel de simulation de la croissance cristalline de GaAs/GaAs (100) faisant objet d'un magister en physique de matériaux de M^{lle} Ali Messaoud (1997).

Nous présenterons ce travail dans trois chapitres qui suivent :

- Le chapitre 1 pose les bases des problématiques de la croissance cristalline que nous abordons au cours de cette thèse. Nous présenterons rapidement la hiérarchie et les caractéristiques des modèles. En particulier, nous discutons ici de la technique de Monte Carlo d'une manière générale, et dans le cas particulier de la simulation de la croissance cristalline.
 - Le chapitre 2 présente les principes de notre simulation à l'échelle atomique de la croissance cristalline homoépitaxiale et des moyen informatiques de sa mise en ouvre. Nous présenterons les traits essentiels de notre modèle où nous avons pris les travaux expérimentaux d'Arthur [22-23], Foxon et Joyce [24-26] ainsi que les travaux de simulation de J. Singh [27] et A. Madhukar [10] comme directive.
-

- Le chapitre 3 sera consacré à la présentation de nos résultats relatifs à la dynamique de croissance de GaAs sur une surface parfaite et stabilisée Arsenic. Nous validons nos résultats par comparaison avec ceux obtenus expérimentalement et théoriquement par ceux de A. Madhukar et ses collaborateurs ainsi que ceux de N. V. Peskov.

Nous étudions l'effet des conditions de croissance sur l'évolution du taux de couverture, la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium (L_{moy}) et le coefficient de diffusion du Gallium (D_{Ga})

Nous analysons aussi l'effet des ces conditions sur les oscillations RHHED, largement utilisées en epitaxie par jet moléculaires, afin de fixer les conditions optimales de la croissance de quatre couches atomique de GaAs par E.J.M. Pour examiner qualitativement l'évolution de l'intensité RHEED au cours de la croissance nous avons introduit un calcul de la rugosité et de la densité de marches en surface. Ces dernières nous ont permis une meilleure analyse de la croissance in-situ de GaAs/GaAs (100).

Chapitre I

Rappel sur la croissance cristalline

INTRODUCTION

Dans ce chapitre, nous présentons les travaux conduits jusqu'à présent dans le domaine de la modélisation et de la simulation de la croissance cristalline. Nous présentons rapidement la hiérarchie des outils de simulation qui sont à notre disposition pour l'étude de la croissance des films minces. Nous abordons les modèles énergétiques fondamentaux les plus utilisés dans la simulation de la croissance cristalline. Nous donnons ensuite la description du processus physique qui régit la croissance par EJM. Nous présenterons aussi les éléments clés d'un bâti d'épitaxie par jets moléculaires. Enfin, dans une dernière partie, nous présentons d'autres techniques de croissance concurrentes à l'EJM.

I- HISTORIQUE DES MODELES DE SURFACE EN CROISSANCE CRISTALLINE :

L'intérêt porté à la croissance cristalline remonte au siècle dernier où J.W.Gibbs [1] en 1878 a proposé un premier modèle des mécanismes multiparticulaires complexes. Ses travaux ont permis par la suite à M.Volmer et A.Webber [2] de développer la notion de fluctuation de la densité atomique dans le type de croissance proposée par J. W.Gibbs.

L'approche atomique des mécanismes de croissance d'un solide à partir d'une phase gazeuse a été explicitement introduite en 1927 par Kossel [3], traitant les atomes sous forme cubique s'empilant les uns sur les autres et susceptibles de se déplacer en surface. Il a essentiellement soulevé l'importance de la présence des coins et des marches et leur influence sur la cinétique et sur les mécanismes d'une croissance épitaxiale faite sur une surface parfaite.

En 1951, W.K.Burton, N.Cabrera et F.C.Frank [4], sur les bases du modèle cubique de Kossel, se sont rendus compte que les vitesses de croissance observées expérimentalement sont plus grandes que celles calculées. Cette observation les a amenés à postuler la nécessité de la présence de marches dans le mécanisme de croissance et ont déduit que celle-ci a essentiellement lieu autour des dislocations vis où les marches se reproduisent par continuité.

Le second concept important discuté aussi par ces auteurs est que la densité de marches d'un plan cristallographique particulier, c'est à dire la rugosité de la surface, dépend des forces de liaisons interatomiques entre les atomes de la surface et leurs voisins.

Par suite l'introduction de l'aspect microscopique de la croissance s'avère d'un très grand intérêt dans la mesure où les processus microscopiques intervenant à la surface peuvent altérer les propriétés du film épitaxié. C'est avec l'avènement des calculateurs numériques en 1970 que la voie a été ouverte aux premières tentatives de simulation particulière sur ordinateur. Les premières simulations de la croissance cristalline '**Homoépitaxique**' étaient basées sur le modèle de Kossel [5-8]. Ces simulateurs utilisaient déjà la méthode de '**Monte Carlo**' pour gérer le caractère événementiel de l'adsorption des atomes de la phase gazeuse ou de la diffusion en surface de la phase solide. Ces simulateurs ont mis en évidence les mécanismes physiques intervenant dans la croissance et ont servi d'outil susceptible de guider l'expérimentation.

II- LES MODELES TRADITIONNELS DE LA SIMULATION :

Jusqu'aux années 70 les atomes étaient représentés sous une forme simple : cubique pour le modèle de Kossel connu universellement sous le nom de modèle 'S.O.S.' ne prenant pas en compte les déformations des liaisons interatomiques. Nous citons L. Alexandrov [9] parmi les premiers à modéliser l'atome sous forme d'un tétraèdre. Dans ces modèles, la réactivité chimique entre les phases gazeuse et solide ne rentrait pas en ligne de compte dans l'adsorption d'un atome déposé sur la surface d'un substrat. C'est la raison pour laquelle dans années 80, A.Madukhar et ses collaborateurs [10,11] ont introduit l'effet de la réactivité entre la phase gazeuse et le substrat : les molécules de la phase gazeuse sont physisorbées à l'échelle moléculaire selon la configuration de la couche puis se décomposent en espèces atomiques pour finalement s'incorporer dans la couche de croissance.

II-1- *Le modèle 'Solid On Solid' de Kossel :*

Les premières simulations de la croissance cristalline étaient essentiellement appliquées au cas d'une croissance homoépitaxiale et ont été basées sur le modèle S.O.S. (Solid On Solid) de W. Kossel[3]. Ce modèle considère un cristal constitué d'un empilement d'atomes cubique mis les uns à côté des autres, dans des positions cristallographiques prédéterminées, avec des liaisons possibles sur les six faces l'interconnectant aux plus proches voisins. L'énergie de liaison est la même sur toutes les faces et l'énergie de liaison totale ne dépend ainsi que du nombre de voisins possédant une face commune avec l'atome.

Dans ce modèle, les atomes adsorbés sont affectés d'un coefficient de collage proportionnel au nombre de proches voisins qui détermine la stabilité de l'atome. Ainsi, les atomes du coin sont relativement plus stables que ceux qui sont isolés sur la surface (Fig. I.1).

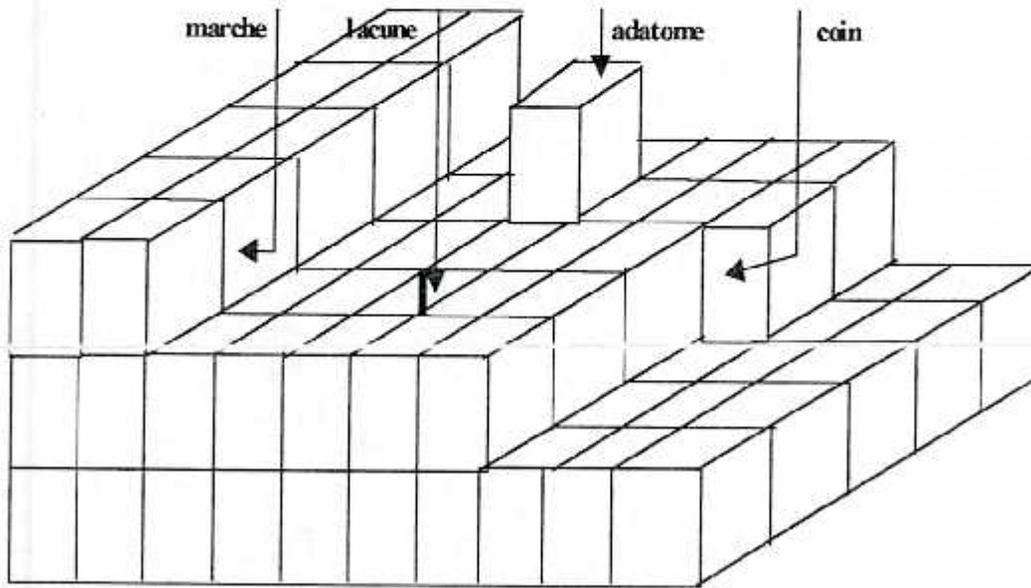


Fig. I-1 : Représentation schématique d'une surface construite par empilement d'atome Cubique, modèle S.O.S

Le modèle de Kossel a apporté une première compréhension des différents aspects de la croissance à partir d'une phase gazeuse notamment par la simplicité des descriptions du dépôt et par l'accessibilité des calculs énergétiques. Les simulations basées sur ce modèle ont permis de préciser les conditions d'une croissance en îlots 3D ou en couche 2D, d'étudier la rugosité de la surface et l'évolution de la configuration d'une couche par germination et formation d'amas. Ils ont pu aussi prendre en compte le mouvement atomique sur la surface et d'étudier la stabilité et l'instabilité des atomes déposés.

Le modèle S.O.S est très bien adapté au traitement de l'homoépitaxie compte tenu de la représentation cubique des atomes sans différence de paramètre de maille. Par conséquent, l'effet des contraintes à l'interface et la formation des défauts ne sont pas mis en évidence.

En outre, il ne prend pas en compte les déformations des liaisons interatomiques. Ainsi la simulation de la croissance de couches de matériaux composés ne peut être traitée dans le cadre de ce modèle. Entre autres, la réactivité chimique entre la phase gazeuse et solide ne rentre pas en ligne de compte dans l'adsorption d'un atome déposé sur la surface d'un substrat.

En effet, lors d'un dépôt, une véritable réaction chimique intervient entre la surface et les molécules ambiantes. Une large part du processus de croissance est donc définie par les caractéristiques locales (nature des atomes et leurs liaisons) de la surface et celle de l'environnement réactant. Ce n'est que vers 1980 et avec le modèle de réactivité de surface de A. Madhukar que cet obstacle a pu être franchi.

II-2- *Modèle de la réactivité moléculaire des surfaces : A.Madhukar*

L'introduction des effets de réactivité entre la phase gazeuse et la phase solide, par A. Madhukar a permis de compléter très utilement cette approche S.O.S. Ainsi, dans les modèles précédents les atomes adsorbés sur la surface sont de nature atomique et sont simplement affectés d'un coefficient de collage. Mais, on sait que les atomes de la phase gazeuse se présentent le plus souvent comme une molécule qui subit à l'interface une transformation qui peut être complexe : physisorption, dissociation, incorporation. Le modèle de A Madhukar et al [11] introduit cette réactivité de la surface en relation avec la configuration atomique locale. On est alors amené à considérer les diverses réactions qui conduisent à la dissociation des molécules en atomes qui seront finalement incorporés dans la couche en croissance.

L'exemple de Madhukar porte sur le dépôt des atomes de Gallium (Ga) et des molécules d'Arsenic. Le Gallium sous sa forme atomique se dépose directement sur la surface, par contre l'Arsenic peut se présenter sous une forme diatomique As_2 ou tétratomique As_4 . Ainsi, A.Madhukar et al postulent le passage des molécules d'Arsenic de la phase gazeuse à une phase intermédiaire physisorbée, suivie par la décomposition en espèces atomiques sur des sites privilégiés, pour aboutir à une incorporation définitive de ces atomes par passage vers un état chimisorbé. Cette liaison avec le substrat s'établit avec une constante de réaction supposée dépendre de la configuration locale au voisinage de la molécule physisorbée.

La figure (I.2) montre les quatre configurations locales possibles qui selon A.Madhukar permettent la décomposition de la molécule As_2 . Chacune des configurations est caractérisée par une constante de réaction R_i ($i=1$ à 4) qui fixe la vitesse locale d'incorporation des atomes dans la phase solide.

Cette vitesse varie donc dans le temps en fonction :

- De la pression partielle en As_2 .
- Des constantes de réaction R_i .
- Des configurations locales du Ga sur la surface.

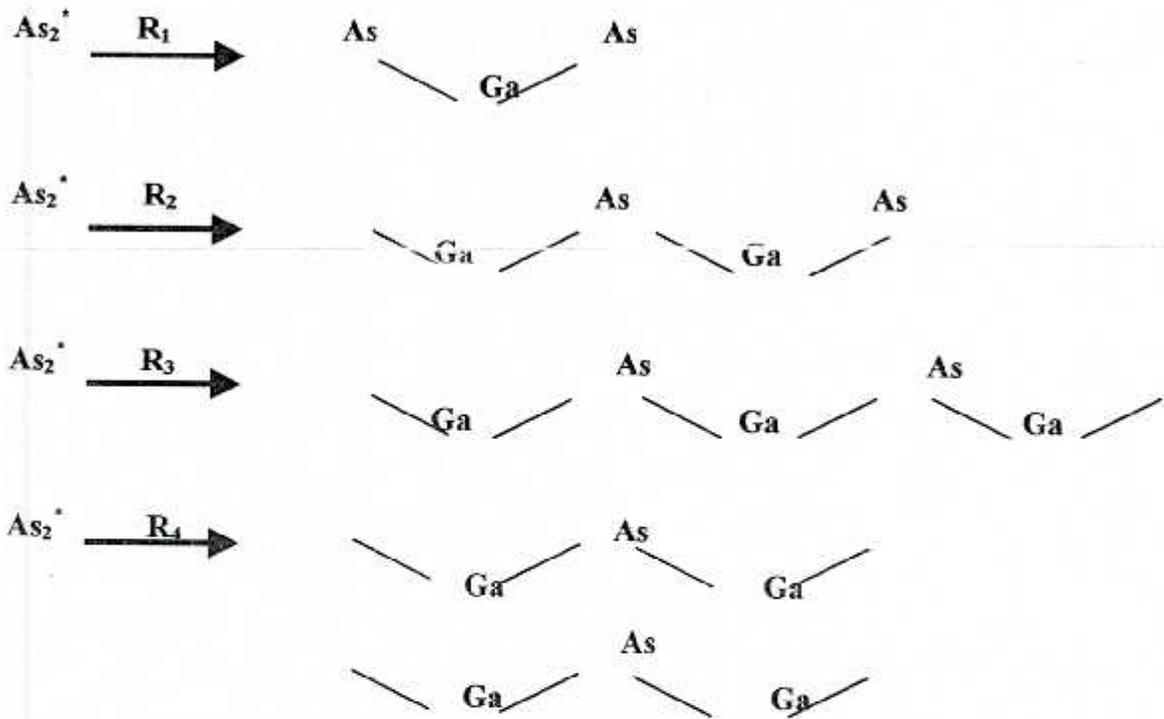


Fig. I-2 : Les configurations les plus probables pour un dépôt d' As_2 selon A. Madhukar [10]

Les deux mécanismes de croissance étudiés par A. Madhukar et al [12-13] sont **RLI** (Reaction limited Incorporation) et **CRLI** (Configuration Limited Reactive Incorporation) :

◆ Le premier, appelé **RLI**, correspond au cas des faibles valeurs de R_1 et R_2 (telles que 10 et 20 impact/site.s respectivement). Ce régime et comme l'indique son nom, c'est la réactivité de l'Arsenic avec le Gallium qui limite l'incorporation de l'Arsenic. Ainsi les atomes de Ga couvrent progressivement la surface, suivis de très près par les atomes d'Arsenic et la surface est stabilisée Arsenic durant toute la croissance, comme le montre la figure (I.3a).

◆ Le second mécanisme, appelé **CRLI**, correspond à des valeurs élevées de R_1 et R_2 (telles que 1000 et 2000/s respectivement). Dans ce régime, l'incorporation cinétique des atomes d'Arsenic est limitée par les configurations des atomes de Gallium. Pour chaque atome de Ga isolé à la surface, deux atomes d'Arsenic sont incorporés. Comme le montre la figure (I.3b), la couverture des couches de Gallium est menée par celle des couches d'Arsenic, ceci est une conséquence directe d'un taux d'incorporation R_1 rapide. Notons que dans les deux mécanismes, R_3 et R_4 sont supposés infinis.

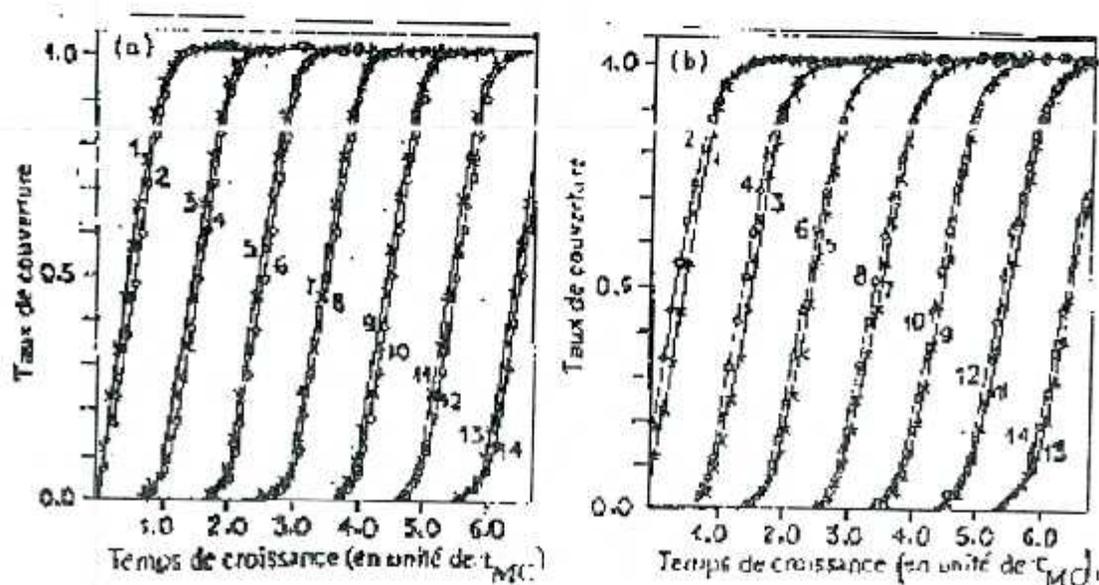


Fig. I-3 : Variation du taux de couverture en fonction du temps lors de la croissance du système GaAs/GaAs (100) :

(a) : Mécanisme de couverture RLI, (b) : Mécanisme de couverture CRLI

Un aperçu du mécanisme de croissance est fourni par le comportement de la vitesse de croissance dans le temps, comme le montre la figure (I.4). Les courbes (a) et (b) représentent les vitesses de croissance dans les deux cas de régime RLI et CRLI respectivement. Dans toute cette expérience, le taux d'incorporation des atomes de Gallium est de 1,1 couche/seconde. La pression d'Arsenic est toujours très élevée de sorte que l'Arsenic est toujours disponible. La vitesse moyenne de croissance est donc déterminée par l'incorporation des atomes de Gallium. Comme nous l'observons dans les deux cas, la vitesse de croissance moyenne est de 2,2 monocouche atomiques par seconde (1Ga+1As).

Sur la courbe (a) (régime RLI), la vitesse est faible au début car l'Arsenic s'incorpore difficilement sur la surface étant donné que les vitesses de décomposition de As_2^* sont faibles. Par la suite, on observe une augmentation de la vitesse de croissance qui est expliquée par une forte réaction des atomes de Gallium avec les atomes d' As_2^* . Par contre pour des taux d'incorporation élevés (courbe (b), régime CRLI), la vitesse est très élevée au début (pratiquement 1,5 fois la valeur moyenne) car à chaque arrivée de Ga, trois atomes (un atome de Gallium et deux atomes d'Arsenic) s'incorporent au lieu de deux. La couche de As se complète donc relativement vite et sa croissance est arrêtée, d'où une diminution rapide de la vitesse de croissance.

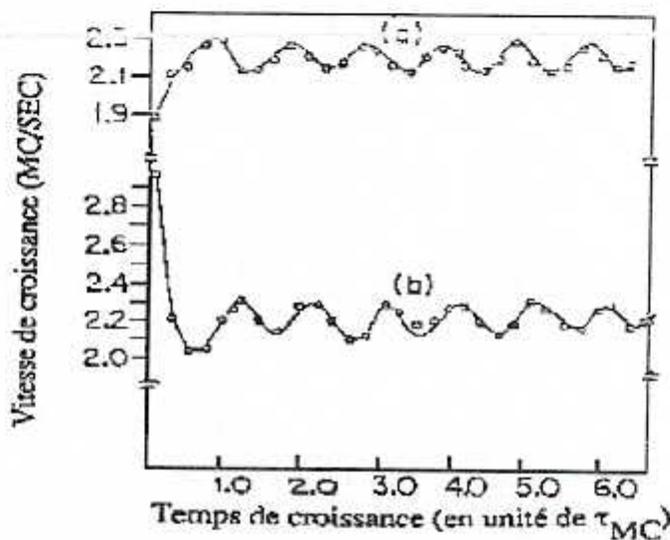


Fig. 1-4 : Vitesse de croissance en fonction du temps pour un taux d'incorporation d' As_2^* :
(a) faible, (b) élevé (τ_{MC} : temps en MonoCouche)

III- NECESSITE DE SIMULER :

Pour approfondir d'une manière exhaustive l'étude de l'homoepitaxie, trois efforts complémentaires sont nécessaires :

- 1- L'essai technologique.
- 2- La caractérisation des couches et des interfaces.
- 3- La modélisation et la simulation de la croissance cristalline.

Ce troisième point est l'objet précis du travail que nous présentons ci dessous, et qui vise à développer un outil de simulation numérique de la croissance cristalline de GaAs/GaAs (100), pour expliquer le mode de croissance et évaluer les caractéristiques de l'interface, par la technique, epitaxie par jet moléculaires 'E.J.M'. Cette technique est très coûteuse et ne concerne que des dispositifs à très forte valeur ajoutée. Ainsi L'intérêt de la simulation est évidente dans la mesure où elle permet d'éviter de nombreux et longs essais expérimentaux.

IV- METHODES DE SIMULATION :

Le graphe de la figure (I.5) montre une hiérarchie des méthodes pour l'étude des films minces, établie sur la base de la taille des systèmes traités et des durées simulées. La première remarque que nous devons faire ici est que chaque modèle possède sa spécificité et ses limitations. Ils sont complémentaires. Ainsi, la démarche dite multi-échelle consiste à utiliser les résultats de simulations d'un niveau de la hiérarchie pour déterminer les paramètres d'un niveau de modèle supérieur.

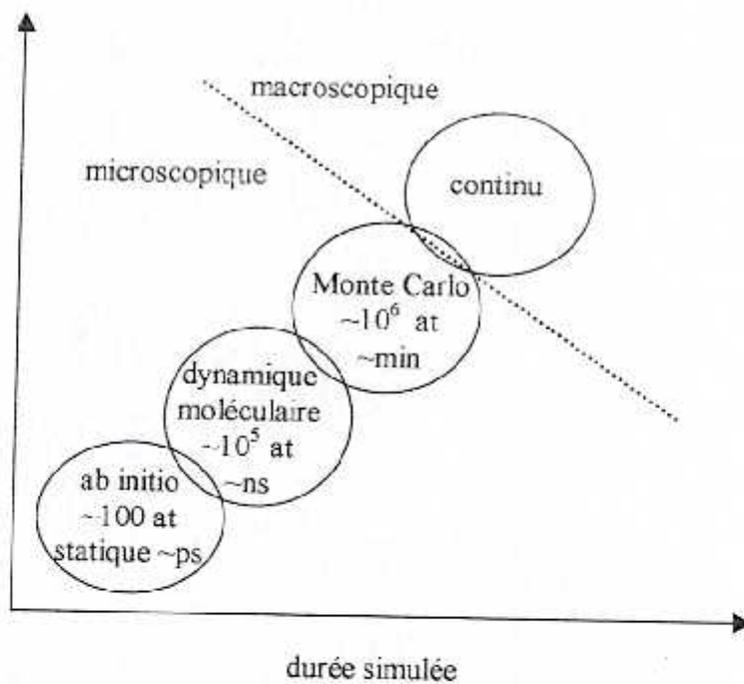


Fig. I-5 : Hiérarchie des méthodes pour l'étude des films minces. Les modèles sont classés suivant la taille des systèmes traités et les durées simulées [14].

IV-1- *Les méthodes ab initio :*

Ces méthodes sont basées sur la résolution de l'équation de Schrödinger du système. Elles ne nécessitent pas l'introduction de paramètres empiriques et sont les plus proches des réalités physiques du système.

En général, en raison de leur complexité, ces méthodes sont utilisées pour déterminer des caractéristiques physiques statiques du système dans une configuration atomique ou après minimisation de l'énergie d'une configuration.

IV-2- *La dynamique moléculaire :*

C'est une méthode qui résout les équations classiques de Newton ou de Hamilton du mouvement des atomes du système étudié. Ainsi dans un système à N atomes, N équations vectorielles différentielles couplées sont à résoudre [15] :

$$m_i \ddot{r}_i = -\nabla_r V = f_i$$

Où m_i est la masse de la particule i , \ddot{r}_i est la dérivée seconde par rapport au temps du vecteur position (c.à.d l'accélération), f_i est la force exercée sur l'atome i et V est l'énergie potentielle du système qui dépend des $3N$ coordonnées atomiques.

Ces équations différentielles sont résolues en discrétisant le temps en intervalles δt et en recalculant les nouvelles positions et impulsions à chaque δt . Pour décrire la trajectoire des atomes δt doit donc être une fraction de la période de vibration des atomes ($10^{-12} - 10^{-13}$ s).

Le choix de δt trop grand peut rapidement conduire à des résultats erronés.

Le potentiel utilisé est un autre point critique dans la méthode. Si l'on désire reproduire les caractéristiques physiques d'un matériau donné, le choix d'un potentiel interatomique correct est essentiel pour ne pas rapidement dévier de la réalité du matériau simulé. Les paramètres utilisés dans ces modèles sont déterminés à partir de résultats expérimentaux ou de simulations ab initio.

Cette méthode est relativement lourde à mettre en œuvre, mais permet communément de simuler sur une machine simple processeur, la dynamique des systèmes contenant de l'ordre de 10000 atomes sur des temps de l'ordre de la nanoseconde. Le temps simulé constitue une sérieuse limitation de la méthode pour traiter des systèmes réels où quelques monocouches atomiques sont déposées par seconde.

IV-3- La méthode de Monte Carlo :

Cette méthode reconstruit statistiquement l'évolution temporelle des films, en contraste avec la dynamique moléculaire déterministe. Les atomes sont placés dans les sites d'un réseau. La diffusion des atomes sur la surface est décrite par des sauts atomiques discrets d'un site à un autre site de la surface, plutôt que par leur trajectoire continue. La fréquence moyenne de réalisation des sauts peut être déterminée expérimentalement, mais plus souvent à partir de calculs de dynamique moléculaire ou *ab initio*.

La méthode de Monte Carlo cinétique est beaucoup plus économique en temps de calcul que la dynamique moléculaire. L'évolution de systèmes de l'ordre du million d'atomes peut être simulée sur quelques minutes. Elle se situe à la frontière entre le microscopique et le macroscopique car elle est basée sur une liste de mécanismes atomiques élémentaires (diffusion atomique de site à site, dépôt d'un atome à un site etc).

Monte Carlo est donc une méthode de choix pour étudier les mécanismes élémentaires de la croissance et leur influence sur la morphologie du film à plus grande échelle.

Quant aux méthodes continues, du point de vue technologique, elles fournissent des informations très précieuses à l'échelle du dispositif mais elles ne décrivent pas les questions de fiabilité liées à la microstructure des films et sont parfois prises en défaut lorsque les effets atomiques ont une forte influence sur la morphologie macroscopique des films.

V- LES MODELES ENERGETIQUES D'INTERACTIONS ATOMIQUES :

Nous avons vu que le modèle S.O.S de Kossel utilise une représentation cubique de l'atome. Il considère que les énergies de liaisons entre plus proches voisins constantes, les atomes sont supposés se placer dans une position naturelle non contrainte.



Cette approche a apporté des résultats intéressants sur les phénomènes de croissance, qui a permis d'expliquer les effets de croissance 2D, 3D. Elle est efficacement complétée par le modèle de A. Madhukar qui introduit la réactivité chimique de surface en liaison avec la configuration locale.

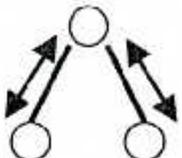
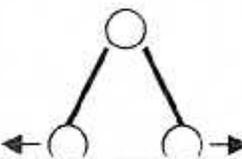
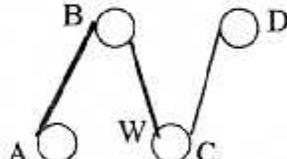
Nombreux sont les chercheurs qui ont utilisé les modèles énergétiques multicorps pour déterminer les caractéristiques thermodynamiques de surface. Parmi ces chercheurs, nous citons : W.A. Tiller et H. Balamanet, T.Halicioglu et E. Pearso [16-17] qui ont traité des modèles de restructuration de surface et d'interaction de marche.

Par ailleurs, ce dernier modèle n'est pas généralement appliqué aux semi-conducteurs. Ceci est dû au fait que, contrairement aux métaux, les semi-conducteurs possèdent une structure cristalline non compacte, avec des liaisons chimiques fortement dirigées. Pour rendre compte de leurs propriétés, on doit introduire, dans le modèle, des interactions à trois corps qui tiennent compte des angles de liaison. Les expressions de ces interactions restent phénoménologiques, fondées sur l'existence d'un minimum d'énergie pour un angle de $109^{\circ} 28'$. Il est évident que l'introduction des interactions à trois corps augmente démesurément non seulement le temps de calcul, mais aussi le nombre de paramètre arbitraire à déterminer à partir des données expérimentales.

Ainsi le modèle phénoménologique qui restent compatibles avec nos capacités de calcul est le modèle d'interaction du champ de forces de valence (V.F.F).

V-1- Le modèle d'interaction de Champ de Forces de Valence :

Le modèle V.F.F [18] conserve la notion de liaison chimique et les déformations des liaisons et des angles pour la détermination des contraintes mécaniques. L'énergie totale se répartit alors entre l'énergie chimique qui est l'énergie de l'atome en position non contrainte et une énergie de contrainte (Tab.I.1).

Désignations des énergies	Formulations mathématiques simplifiées	Configurations des contraintes
Energie de compression des liaisons	$E_c = \frac{1}{2} K_r (l_i - l_0)^2$ l_0 : longueur à l'équilibre l_i : longueur après déformation K_r : constante de force	
Energie de flexion	$E_f = \frac{1}{2} K_\theta (\theta_i - \theta_0)^2$ θ_0 : angle à l'équilibre θ_i : angle après déformation K_θ : constante de force	
Energie de torsion	$E_t = \frac{V_t}{2} (1 + \cos w)$ V_t : constante de force w : angle formé entre le diédrique situé entre les plans ABC et BCD	

Tab. I-1 : Formulation mathématique approchée des différents types d'énergie de contrainte

Dans le tableau (I-1) nous avons donné les expressions des énergies des différentes contraintes et les représentations schématiques des configurations correspondantes. L'énergie de contrainte totale E_T peut se présenter sous la forme d'une somme d'énergie : de compression, de flexion, et de torsion.

$$E_T = E_c + E_f + E_t$$

Cette énergie de contrainte est nulle si l'atome considéré est en position *normale* (*Diédrique*) vis à vis des atomes qui l'environnent. Elle augmente au fur et à mesure que sa position s'écarte de cette position *Diédrique*.

VI- CROISSANCE EPITAXIALE DES COUCHES MINCES :

VI-1- Les principaux processus cinétiques :

Les principaux processus impliqués dans la croissance des couches minces à partir de la phase vapeur sont représentés schématiquement sur la figure (I.6). Dans la gamme de température [530°C – 620°C] les molécules sont dissociées dès leurs adsorptions sur la surface de croissance.

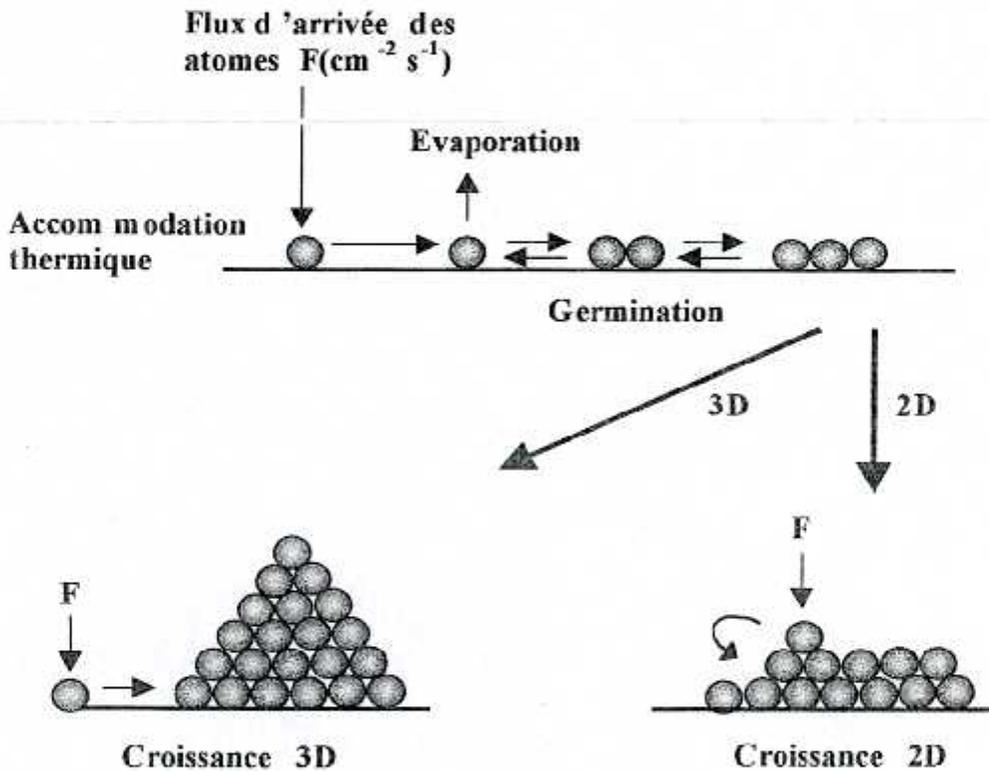


Fig. I-6 : Représentation schématique de différents processus impliqués dans la croissance des couches minces

Le flux incident des atomes ou des molécules doit d'abord être accommodé thermiquement avec le substrat. Ceci a typiquement lieu en l'espace de quelques périodes de vibration c'est ce qui nous permet de conserver l'hypothèse d'une température des molécules adsorbées de même ordre de grandeur que celle du substrat[19].

D'autre part, pour des conditions expérimentales données, plusieurs modes de croissance peuvent être distingués. Il n'est pas facile de décrire tous les processus, liés à la croissance

épitaxiale, par une théorie unifiée, d'où la nécessité de la simulation qui s'avère un outil de choix pour l'étude, à l'échelle atomique, des mécanismes les plus dominants dans la croissance cristalline des couches minces.

VI-2- Modes de croissance des couches minces :

Il existe trois principaux modes de croissance des couches minces figure (I.7) qui présente l'évolution de la morphologie de la surface au fur et à mesure que la couverture de la surface (exprimée en monocouches, MC) augmente.

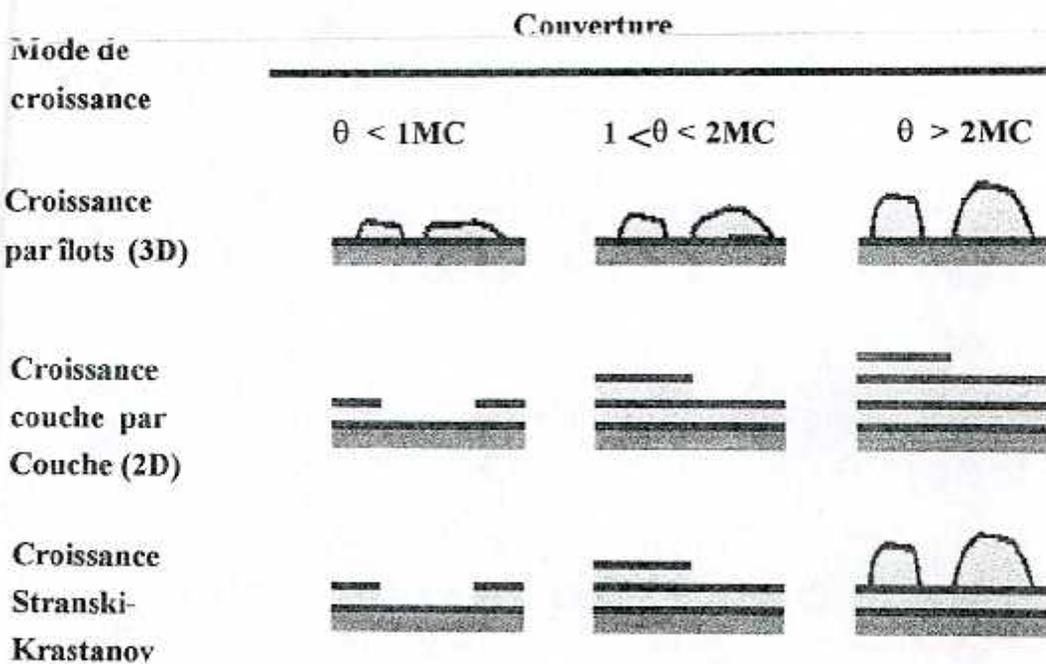


Fig. I-7 : Représentation schématique des trois modes de croissance [20].

- Pendant la croissance tri-dimensionnelle (3D), ou croissance **Volmer-Weber**, de petits germes sont formés à la surface du substrat. Ceux-ci croissent pour former des îlots qui coalescent ensuite pour donner une couche mince continue. Ce mode de croissance est habituellement favorisé lorsque les atomes formant la couche déposée sont plus fortement liés entre eux qu'avec le substrat.

- La croissance bidimensionnelle (**2D**) couche par couche, ou croissance **Frank-van der Merwe**, est favorisée lorsque l'énergie de liaison entre les atomes déposés est moindre ou égale à celle entre la couche mince et le substrat. En plus de la croissance homoépitaxiale, on retrouve de nombreux exemples en hétéroépitaxie des semi-conducteurs (par exemple GaAlAs/GaAs) et des métaux (par exemple Cd/W).
- Le troisième mode de croissance, nommé **Stranski-Krastanov (SK)**, est une combinaison des deux modes précédents : après un début de croissance bidimensionnelle, on observe un changement de mode de croissance alors que la formation d'îlots devient énergétiquement favorable. Cette transition d'un mode de croissance **2D** vers **3D** n'est pas encore complètement comprise bien qu'elle puisse être induite par la relaxation de l'énergie élastique emmagasinée dans une hétérostructure contrainte.

VI-3- *Méthodes expérimentales pour la croissance épitaxiale :*

Il existe principalement 3 types de méthodes expérimentales pour la croissance épitaxiale des couches minces :

- l'épitaxie par jet moléculaire, EJM ou MBE (Moléculaire Beam Epitaxy)
- l'épitaxie en phase liquide ou LPE (Liquid Phase Epitaxy)
- l'épitaxie en phase vapeur ou VPE (Vapor Phase Epitaxy)

Pour chacune de ces techniques, des appareillages spécifiques sont mis en œuvre (Appendice A). Nous limitons notre étude, dans ce paragraphe, à la description de la technique MBE sur laquelle est basée notre simulation.

VI-3-1- Epitaxie par jet moléculaires [21]:

Les différents processus qui conduisent à une croissance épitaxiale nécessitent des surfaces non polluées par des impuretés superficielles, ce qui impose une technologie en ultravide.

Il a fallu attendre les années soixante-dix, le développement des techniques de l'ultravide et les travaux de J. Arthur et A. Cho [21] aux laboratoires Bell, pour que la technique d'épitaxie par jets moléculaires prenne son essor. Ces derniers ont montré la bonne qualité de la croissance sur des substrats monocristallins de GaAs dans une enceinte où règne un vide très poussé (10^{-10} à 10^{-11} Torr).

Une des particularités de l'EJM est la faible vitesse de croissance des couches, typiquement 1 à 2 $\mu\text{m/h}$ ce qui correspond à une à deux monocouches par seconde. La vitesse de croissance et par conséquent l'épaisseur de la couche sont contrôlées par une régulation précise des températures des cellules. De plus, les flux moléculaires ou atomiques (cellule de Knudsen) peuvent être rapidement interrompus par l'interposition de caches mécaniques entre les creusets et le substrat. Cette précision dans le contrôle des flux permet la réalisation de profils de composition et de dopage très abrupts

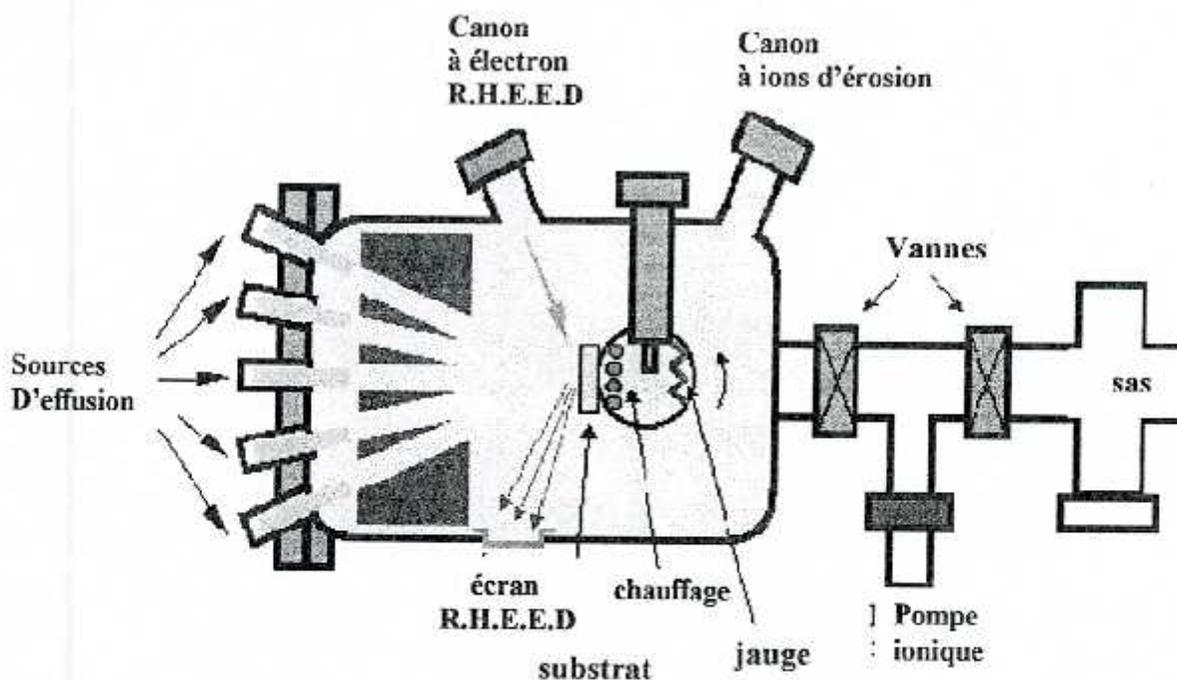


Fig. 1-8 : Bâti d'épitaxie par jet moléculaire, EJM, ou Molecular Beam Epitaxy, MBE (d'après D.V Morgan et K. Board [21]).

L'appareillage M.B.E (Fig. I-8) consiste essentiellement en une chambre à vide, un système de chauffage pour le substrat et des sources à jet moléculaires obtenues par effusion. En outre, tout un système de commande automatique est nécessaire pour obtenir les conditions de croissance.

Enfin, l'environnement ultravide est un des grands atouts de l'épitaxie par jets moléculaires. Ainsi, la possibilité de posséder des instruments d'analyses "in-situ" permet tous les contrôles et les caractérisations dont les principes nécessitent un vide poussé tel que : la diffraction d'électrons, spectroscopie Auger, ESCA (XPS ou UPS), diffraction des rayons X, RHEED (Reflection High Energy Electron), etc... On peut ainsi, en permanence, vérifier la cristallinité du cristal en cours de croissance.

Toujours basée sur l'utilisation de cellules contenant les éléments III, V et dopants sous forme solide, l'EJM s'est rapidement étendue à la croissance de composés tel que l'AlGaAs, le GaInAs et l'AlInAs sur substrat GaAs et/ou InP.

VI-3-2- *Autres techniques de croissance concurrent la MBE[21] :*

Depuis les années 70, une autre méthode de croissance c'est fortement développée : l'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (EPVOM, MOCVD : **Metalorganic Chemical Vapor Phase Deposition**). Cette méthode est basée sur la réaction de flux gazeux organiques (Triméthylgallium et Diéthylarsenic par exemple) à la surface d'un substrat chauffé à haute température. Après la résolution de plusieurs problèmes inhérents à cette méthode (taux d'impureté important), cette technique s'est avérée être un concurrent redoutable face à l'EJM car elle ne nécessite pas d'enceinte ultra-vide.

De plus, pendant de nombreuses années, ce fut la seule technique disposant de sources de phosphore sous forme de phosphine PH_3 ou de Triéthylphosphore et donc la seule retenue pour la croissance des matériaux semi-conducteurs phosphorés tels que InP ou GaInAsP dont l'intérêt technologique pour la réalisation de diodes lasers par exemple, n'est plus à démontrer.

Du mariage de la MOCVD et de la MBE est alors né le concept d'épitaxie par jets moléculaires à sources gazeuses (EJM-SG = GSMBE : **Gas Source Molecular Beam Epitaxy** aussi appelé HSMBE pour **Hydride Source Molecular Beam Epitaxy**). La méthode d'EJM à sources gazeuses est née de la substitution des cellules standards solides d'éléments V par une ou plusieurs cellules décomposant à haute température les gaz tel que l'arsine (AsH_3) et la phosphine (PH_3).

Récemment une autre technique de croissance a vu le jour : l'Épitaxie par Jets Chimiques (EJC = CBE : **C**hemical **B**eam **E**pitaxy aussi appelé **MOMBE** pour **M**etal**O**rganic **M**olecular **B**eam **E**pitaxy). Cette dernière reprend le principe de la MOCVD et l'utilisation des organométalliques et/ou des hydrures pour toutes les sources d'éléments, mais dans une enceinte sous ultravide.

Chapitre II

Modélisation et Simulation
de la Croissance Cristalline
du système GaAs/GaAs(100)

INTRODUCTION :

Nous proposons dans ce chapitre une description simplifiée du modèle de simulation de la croissance de deux couches moléculaires de GaAs/GaAs(100), ainsi que l'organigramme du logiciel établi. Ce logiciel est nommé par notre équipe 'SimGaAs2' (*Simulateur de GaAs/GaAs (100) version 2*).

Dans l'optique de nos besoins, notre réflexion s'est appuyée sur la méthode de **Monte Carlo** afin de gérer l'aspect aléatoire des événements ayant lieu en surface. Nous considérons à ce propos de nouveaux mouvements atomiques : *passage aux accrochés*. Ces derniers sont reliés en particulier aux diffusions inter-couches.

I- LA MODELISATION :

I-1- Bases théoriques et expérimentales de la modélisation :

Pour l'élaboration du modèle traitant des mécanismes de croissance des couches moléculaires de GaAs, nous avons pris les travaux expérimentaux d'Arthur [22-23], Foxon et Joyce [24-26] ainsi que les travaux de simulation de J. Singh [27] et A. Madhukar [10] comme directive. Nous présenterons dans cette section les traits essentiels du modèle utilisé :

I-1-1- *Choix du flux d'Arsenic :*

La première considération importante se base sur le choix du flux d'Arsenic, qui peut être obtenu soit à partir d'une source d'As₄ ou d'une source d'As₂.

Compte tenu du domaine de pression d'effusion du gaz du creuset (10⁻⁶ à 10⁻⁷ Torr) pendant l'épitaxie, on peut considérer que le régime est moléculaire (l'hypothèse des gaz parfaits) : c'est à dire qu'il n'y a pas de collisions entre les molécules pendant le trajet creuset-substrat.

A titre d'exemple, le calcul du libre parcours moyen \bar{l} des atomes de Gallium, à partir de l'expression II-1 [19] :

$$\bar{l} = \frac{K_B T_F}{\pi \sqrt{2} \sigma^2 P_F} \quad \text{II-1}$$

où K_B est la constante de Boltzmann, σ le diamètre des particules, T_F et P_F représentent respectivement la température et la pression du flux incident

donne pour une pression $P_F = 10^{-6}$ Torr, une valeur de l'ordre de 10^6 mètres, ce qui est grand devant la distance creuset- substrat (Fig. II-1). L'hypothèse faite est donc justifiée.

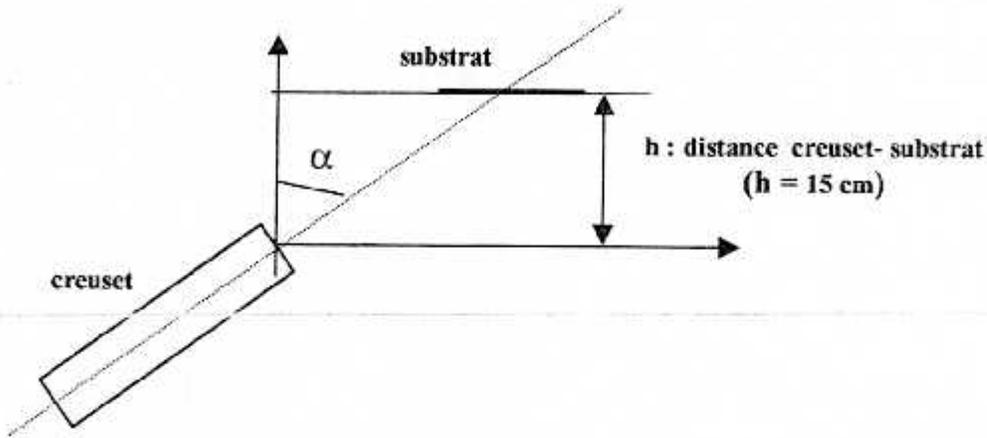


Fig. II-1: Schéma montrant la géométrie du système cellule- substrat dans le bâti de l'épitaxie par jet moléculaire [19].

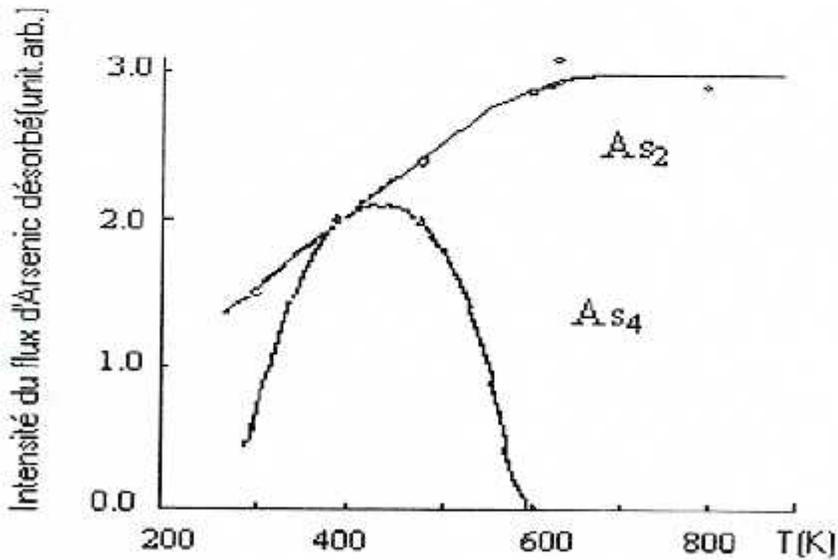
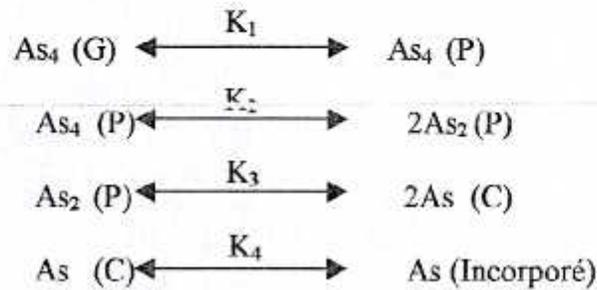


Fig. II-2: Variation de l'intensité des flux As_2 et As_4 désorbés en fonction de la température du substrat. Le flux incident est $J=10^{13}$ mol.cm⁻² [26]

La cinétique de surface a été étudiée par Arthur[23] et également par Foxon et Joyce [24,26], grâce au couplage d'une technique de spectrométrie de masse avec les oscillations d'intensité RHEED, ont montré que, lors de la croissance cristalline du système GaAs/GaAs(100), et dans la gamme de températures [500°C-900°C], la valeur maximale du coefficient de collage d'As₄ ne peut dépasser 0,5 alors que le coefficient de collage de As₂ peut atteindre l'unité [25-26]. Ceci est dû, selon Arthur, au passage de As₄ par plusieurs étapes intermédiaires avant de s'incorporer :



où K_1, K_2, K_3 et K_4 sont les constantes de réaction.

G, P et C représentent respectivement l'état Gazeux, Physisorbé et Chimisorbé.

Les résultats obtenus (Fig. II-2) montrent que la composition chimique de la couche épitaxiée à des températures du substrat supérieures à 600 K n'est formée que de molécules diatomique «As₂». Comme la gamme de températures utilisée dans notre simulation est supérieure à 600⁰ K, donc la molécule d'Arsenic considérée sera sous forme diatomique.

I-1-2- Choix de la surface de croissance :

A/ La taille et l'orientation du substrat :

Le deuxième trait du modèle consiste en la considération d'un substrat GaAs de surface plane et idéale (Fig. II-3), non reconstruite, d'orientation (100) et stabilisée en Arsenic[28].

Géométriquement, la surface du substrat est représentée par un carré de (M×M) sites. La dimension de M est prise égale à 30 et la hauteur de croissance simulée est de quatre (04) couches atomiques (Fig. II-4). Notons que les études de Monte Carlo ont été portées sur des dimensions de (20×20), (30×30), et (40×40) sites avec la périodicité des conditions de

limite, mais il a été trouvé qu'une dimension de (30×30) sites était suffisante pour des résultats convergents[29].

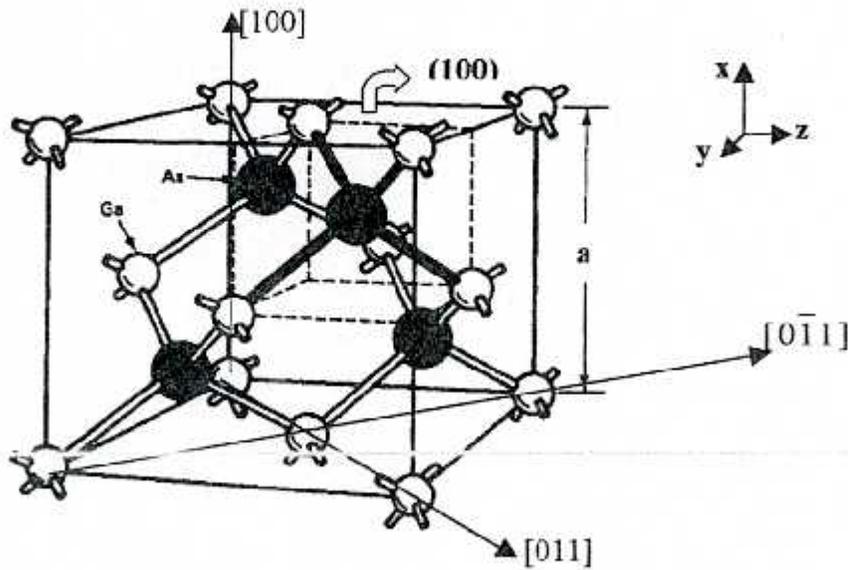


Fig. II-3 : Structure cristalline Zinc blende de GaAs. Le paramètre de maille de GaAs est $a = 5.65 \text{ \AA}$ [30].

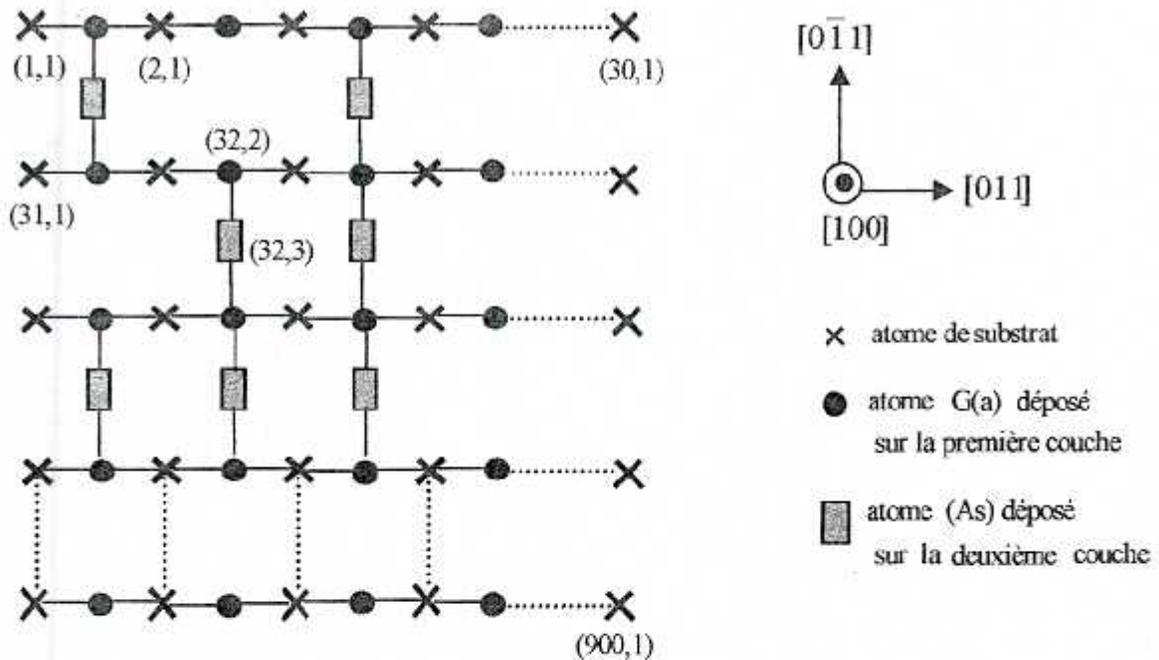


Fig. II-4 : Schéma montrant le repérage numérique des sites d'adsorption sur une surface de dimension (30×30) sites au cours de la croissance des quatre (04) couches monoatomiques de GaAs(100).

B/ Présentation de la surface de croissance simulée :

Le point de départ de notre simulateur est la déclaration d'une surface carrée de (30×30) sites pour l'adsorption du Gallium. Cette surface est orientée suivant la direction cristallographique $[100]$ de la structure Zinc Blende de GaAs (Fig. II-3).

Deux directions possibles de déplacement intra-couches des atomes de Gallium et d'Arсениc caractérisées par une mobilité élevée en surface sont $[011]$ et $[0\bar{1}1]$ respectivement.

Chaque site atomique est représenté par le couple numérique (N_s, N_c) , où N_s désigne le numéro du site d'adsorption variant de 1 à 900 alors que N_c est le numéro de la couche (variant de 1 à 5). Nous associons $N_c = 1$ au substrat et les numéros 2, 3, 4 et 5 de N_c aux couches épitaxiées (Fig. II-4).

C/ Conditions aux limites :

Afin de prendre en considération les effets de bord sur la portion du cristal simulé et pouvoir étendre le calcul au substrat de plus grande taille, nous avons utilisé des conditions aux limites périodiques selon les deux directions $[011]$ et $[0\bar{1}1]$ de la surface (100) , et sur toutes les couches. Le substrat infini est donc découpé en sections identiques (Fig. II-5), et le calcul se porte sur une seule section.

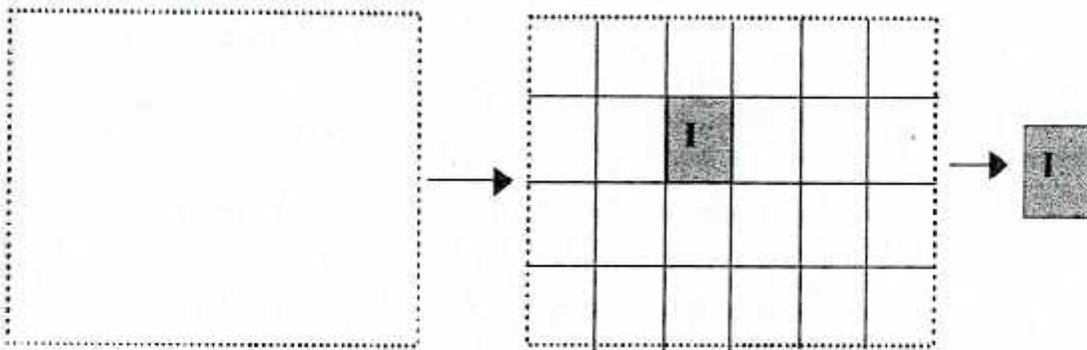


Fig. II-5 : Schéma montrant l'échantillonnage d'une surface infini [31].

Pour illustrer le concept des conditions aux limites appliquées à la section I, on peut dire que lorsqu'un atome sort de la section, un atome rentre par le coté opposé et dans la même direction.

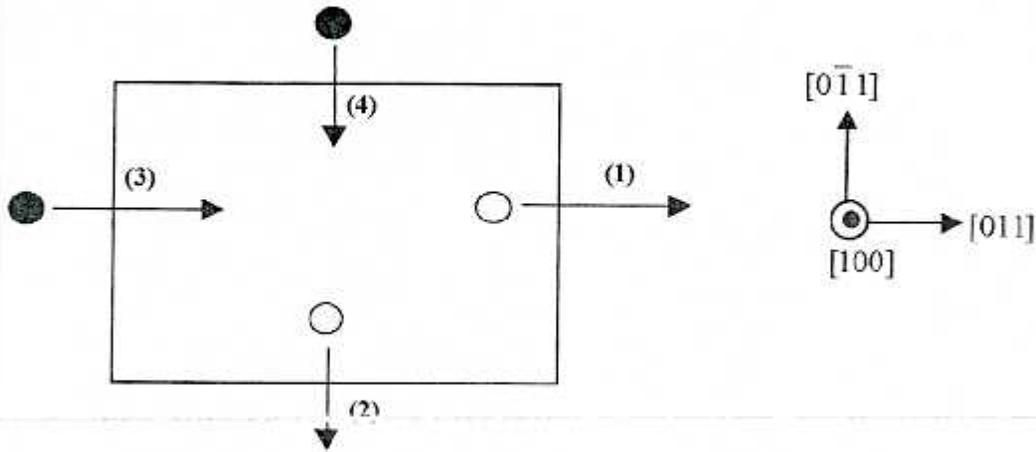


Fig. II-6 : conditions aux limites appliquées à la section I [32].

Autrement dit, si les atomes (1) et (2) de la figure (II.6) sortent du cristal ceci signifie que les atomes (3) et (4) entrent dans le cristal.

I-2- Les configurations :

A) Les configurations d'adsorption de la molécule d'Arsenic :

La troisième considération concerne les configurations d'adsorption de la molécule d'Arsenic. Deux configurations sont donc retenues pour cette molécule diatomique As_2 :

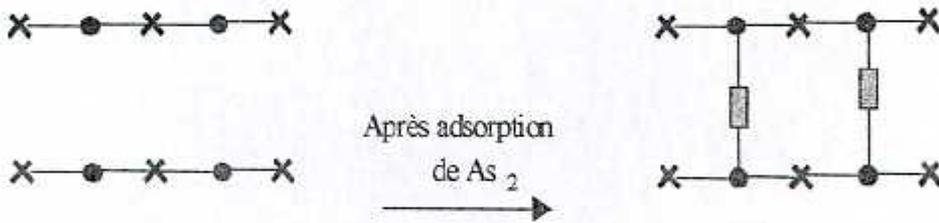
- La première configuration correspond à une molécule As_2 s'attachant, après dissociation à trois atomes de Gallium pour former une seule chaîne atomique (Fig. II-7a).
- La deuxième configuration correspond à une molécule As_2 s'attachant, après dissociation à quatre atomes de Gallium pour former deux chaînes atomiques (Fig. II-7b).

La configuration la plus probable est celle qui fait intervenir un nombre minimal d'atomes de Gallium pour l'adsorption de la molécule d'Arsenic [33].

Ainsi nous considérons la direction $[0\bar{1}1]$ la plus favorable pour l'adsorption de l'Arсениc puisqu'elle ne fait intervenir que trois atomes de Gallium.



(a) : Première configuration d'adsorption de As_2 dissociée sur le Gallium



(b) : Deuxième configuration d'adsorption de As_2 dissociée sur le Gallium

X Atome du substrat

● Atome du gallium

▭ Atome d'Arсениc

Fig. II-7 : les deux configurations prises pour l'adsorption de As_2 sur une surface de Gallium ;
 (a) : Configuration d'adsorption de la molécule As_2 en une seule chaîne atomique.
 (b) : Configuration d'adsorption de la molécule As_2 en deux chaînes atomiques.

Quant un site d'adsorption n'est pas occupé par un atome, le site est dit en configuration **vide**. La configuration **Diédrique** est associée à un site occupé par un atome ayant gardé deux liaisons simples libres en surface. Ces configurations sont résumées dans le tableau (II.1).

Les configurations correspondant d'adsorption des arrivées de la troisième et quatrième couche monoatomique de GaAs (100) sont schématisées dans le tableau (II.2).

Type de configuration	Configuration de la 1ère couche (Ga●)	Configuration de la 2ème couche (As■)
Vide		
Diédrique		

Tab. II-1: Configurations retenues de l'ancienne version du simulateur [34].

Type de configuration	Configuration de la 3ème couche (Ga▲)	Configuration de la 4ème couche (As■)
Vide		
Diédrique		

Tab. II-2: Configurations supplémentaires de la nouvelle version du simulateur.

L'extension du simulateur nous a poussés à considérer d'autres événements que ceux pris en compte dans la première version du logiciel [34]. Les mécanismes qui nous paraissent importants sont les échanges inter-couches par saut de marches.

Ce mécanisme nécessite l'introduction de nouvelles configurations pour les atomes de Gallium et d'Arsenic se trouvant dans les couches atomiques déposées.

B/ Les Nouvelles configurations :

Accroché : est une configuration transitoire permettant les échanges inter-couches, à travers la diffusion des atomes par saut de marches (Fig. II-8). Cette position correspond à un site interstitiel.

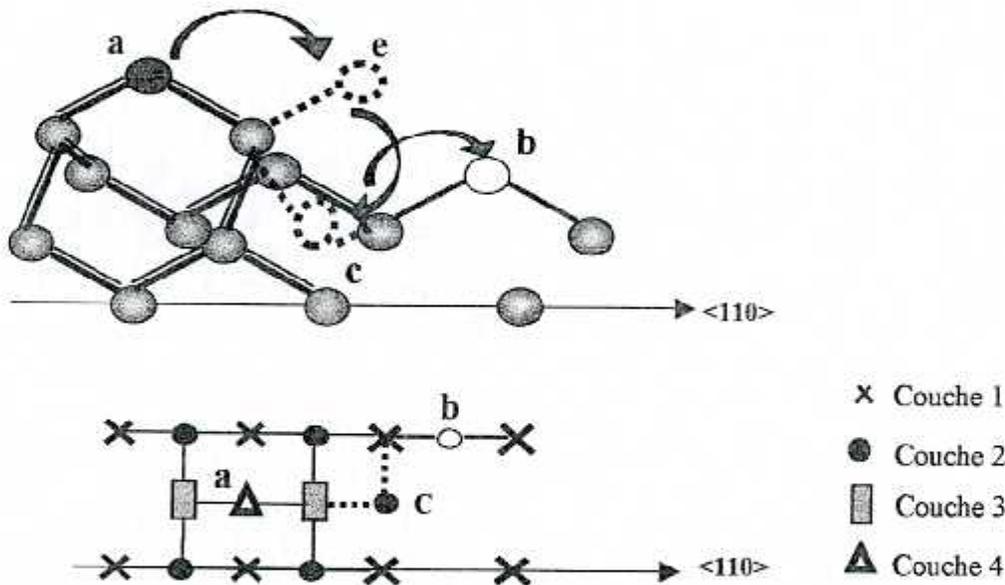
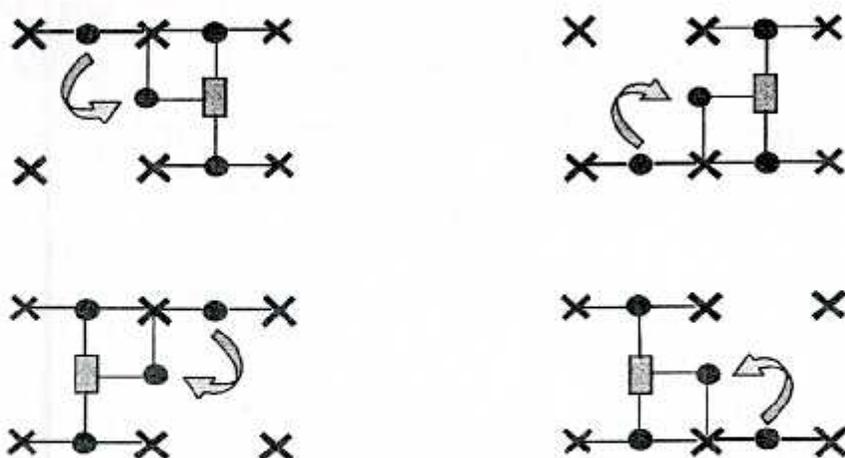


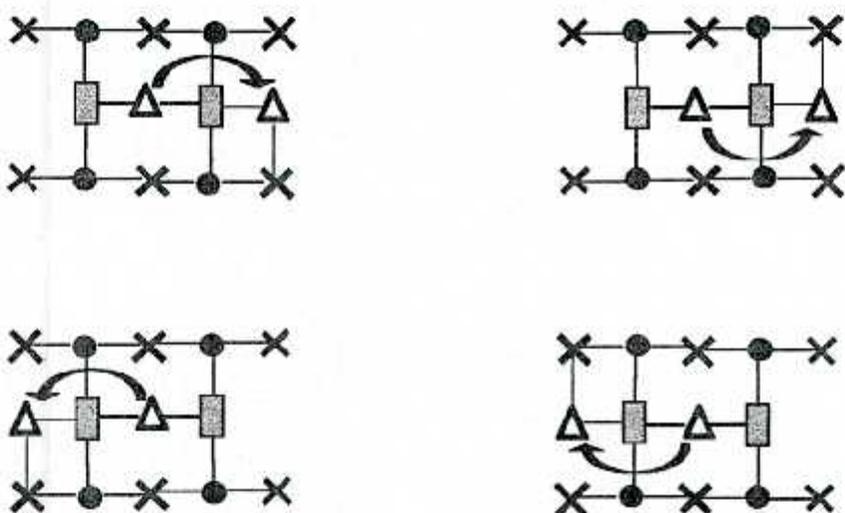
Fig. II-8 : Migration inter-couches au travers une marche. (a) est la position initiale. (e) est un site du cristal, (c) est position interstitielle et (b) est la position finale de l'atome

Pour tenir compte des diffusions inter-couches dans les deux sens, nous avons considéré les accrochés des atomes provenant des couches inférieures et ceux provenant des couches supérieures.

Par des considérations de symétrie, (08) huit configurations accrochées on pu être dénombrées. La figure (II.9) illustre les différentes possibilités faisant intervenir les huit types d'atomes accrochés.



(a) : Les quatre types de configurations Accrochées provenant des couches inférieures



(b) : Les quatre types de configurations Accrochées provenant des couches supérieures

× Atome du substrat

● Atome du Gallium de la première couche

■ Atome d'Arsenic de la deuxième couche

△ Atome du Gallium de la troisième couche

Fig. II-9: Les différentes possibilités de configurations Accrochées intervenant dans les diffusions inter-couches.

I-3- Les événements élémentaires impliqués dans la Simulation:

Dans la croissance cristalline, les atomes de Gallium et les molécules d'Arsenic se trouvent dans deux phases : gazeuse ou adsorbée. Les événements sont supposés être indépendants dans chacune des phases et effectuant des échanges au travers des mécanismes d'adsorption et d'évaporation. Les « Arrivées » d'atomes sur la surface et leurs adsorptions obéissent à la cinétique de la phase gazeuse, alors que les événements « Hors Arrivées » qui se déroulent sur la surface obéissent à la cinétique de la phase adsorbée.

Nous avons considéré dans notre simulation 48 types événements élémentaires dont la description est présentée dans l'Appendice B.

La figure (II.10) explicite les principales possibilités offertes à un atome quittant la phase gazeuse pour être adsorbé sur la surface de croissance.

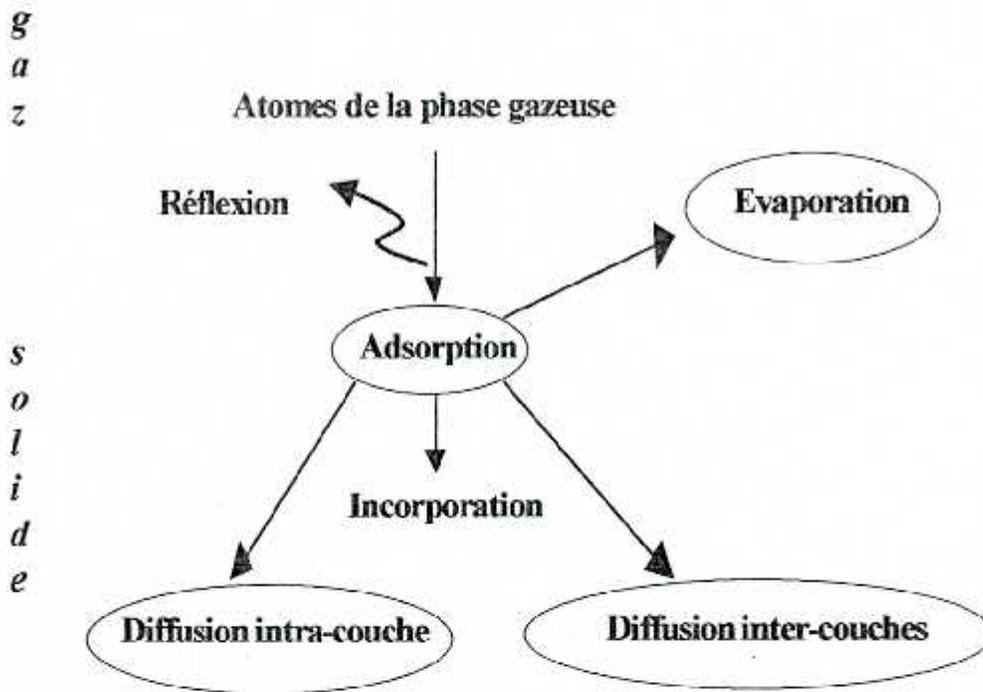


Fig. II-10: Les événements probables intervenant dans le mécanisme de croissance

1-3-1- Événement Arrivée (Adsorption) :

C'est l'adsorption d'un atome de Gallium (Ga) ou d'une molécule d'Arsenic (As₂) heurtant la surface en un site non occupé (vide), avec probabilités λ_{Ga} pour le Gallium, et λ_{As} pour l'Arsenic. Cette probabilité est donnée par la relation suivante [35] :

$$\lambda_X = 3.513 \cdot 10^{23} \frac{P_F \cdot \sigma_X}{\sqrt{M_X \cdot T_F}} \quad \text{II-2}$$

X est l'espèce adsorbée Gallium ou Arsenic

M_X est la masse molaire de l'espèce adsorbée 'X' (en gramme)

T_F est la température du gaz incident (en degré Kelvin)

σ_X est la surface d'un site d'impact de l'espèce adsorbée 'X' (en centimètre carré)

P_F est la pression du gaz incident (en Torr)

Ces probabilités sont liées d'une part aux propriétés physiques de la phase gazeuse et d'autre part à la configuration du site d'adsorption (configuration favorable ou non favorable à l'adsorption de l'arrivée). Nous supposons, dans nos calculs, que l'adsorption se fait toujours en position diédrique.

1-3-2- Événements « Hors Arrivée » :

Comme nous l'avons indiqué au (I-3), un nombre important d'événements peuvent avoir lieu en surface entre deux impacts d'atomes (Fig. II-10). Pour définir la probabilité de réalisation des événement « Hors Arrivée » on utilisera la relation d'Arrhenius [36-37]

$$R = v_0 e^{\frac{-\Delta E}{K_B T}} \quad \text{II-3}$$

avec K_B qui désigne la constante de Boltzmann, T la température de croissance, ΔE est l'énergie d'activation et v_0 un préfacteur représente la fréquence de vibration des atomes.

1-3-2-1- Événement Evaporation :

L'évaporation, c'est le passage d'un atome de Gallium ou d'une molécule d'Arsenic de la phase adsorbée à la phase gazeuse. Par hypothèse, nous avons considéré deux types d'évaporation pour l'atome de Gallium adsorbé en surface :

- Une évaporation diédrique : correspondant à l'évaporation de l'atome du Gallium (Ga) à partir d'un site de configuration diédrique
- Une évaporation accrochée : elle correspond à l'évaporation d'un atome de Gallium à partir d'un site de configuration Accrochée.

Dans les deux cas, l'atome de Gallium quitte la surface en cassant ses deux liaisons avec les atomes plus proches voisins.

Les configurations de surface de ces deux types d'évaporations de l'atome de Gallium sont représentées sur la figure (II.11).

Quant aux atomes d'Arsenic adsorbés, nous avons considéré l'évaporation diatomique, formé d'atomes provenant de la même surface de croissance à partir de deux sites adjacents de configuration d'adsorption Diédrique. La figure (II.12) illustre ce type d'évaporation.

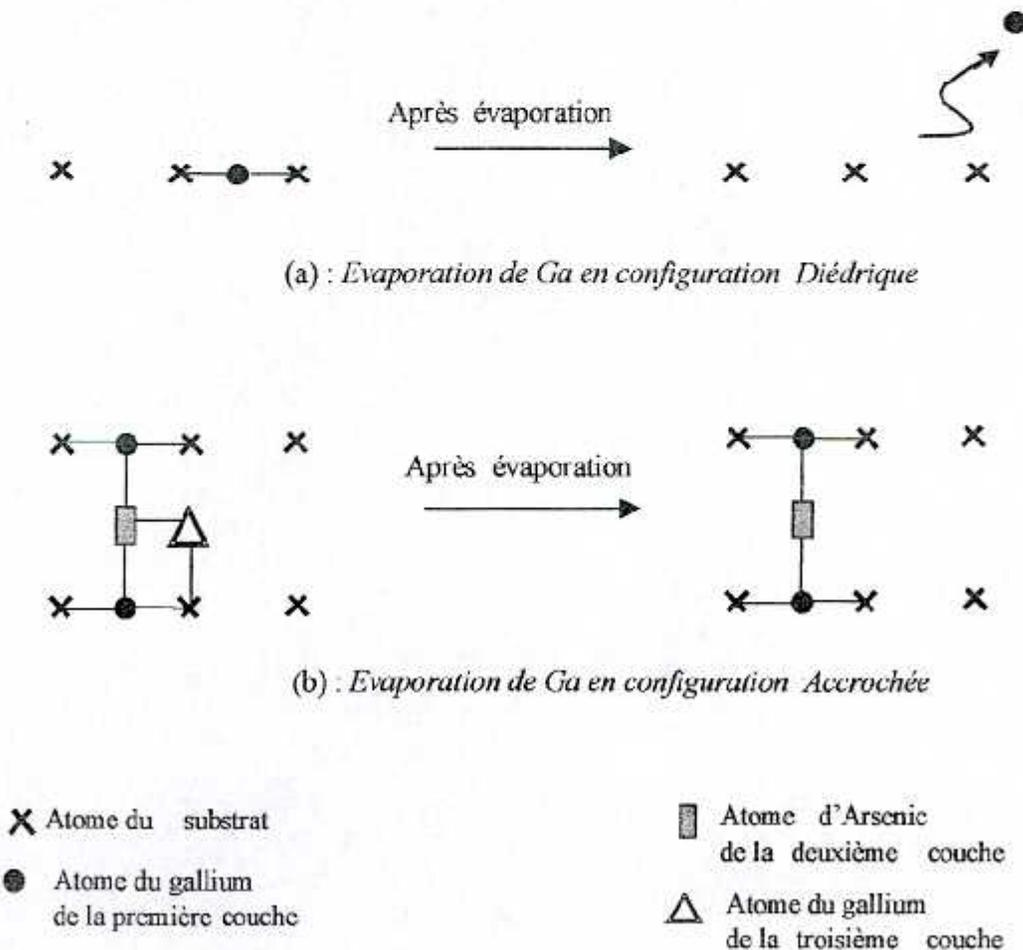
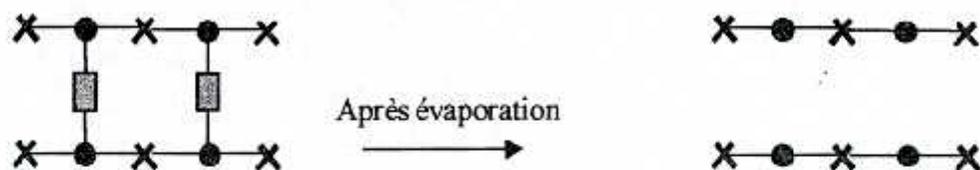
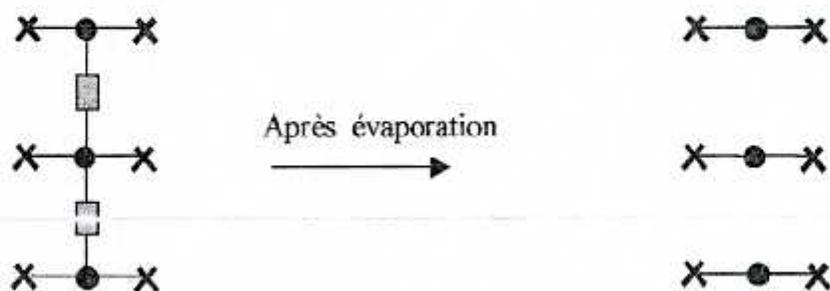


Fig. II-11 : Schéma illustrant les différents types d'évaporation de Gallium



(a) : Evaporation des atomes d'arsenic suivant deux chaînes atomiques.



(b) : Evaporation des atomes d'arsenic suivant une seule chaîne atomique.

X Atome du substrat ● Atome du gallium ◻ Atome d'Arсениc

Fig. II-12: Schéma illustrant l'évaporation de l'Arсениc.

1-3-2-2- Les diffusions intra-couche :

C'est les diffusions atomiques ayant lieu sur la même couche. Ces types d'événements sont pris en compte dans la première version du logiciel [34].

Un atome isolé à la surface, effectuera plusieurs diffusions intra-couche pour atteindre les sites atomiques les plus stables énergétiquement (coin ou amas). L'importance de ce type de diffusion réside dans la formation d'amas de grandes tailles qui permettent l'évolution de la croissance des couches supérieures. On distingue quatre types de diffusions intra-couche (Fig. II-13) :

- Diffusion droite : l'atome du site sélectionné effectue un saut vers le site voisin droit (1).
- Diffusion gauche : l'atome de site sélectionné effectue un saut vers le site voisin gauche (2).

- Diffusion avant : c'est le saut d'un atome de site sélectionné vers le site voisin avant (3).
- Diffusion arrière : c'est le saut d'un atome de site sélectionné vers le site voisin arrière (4).

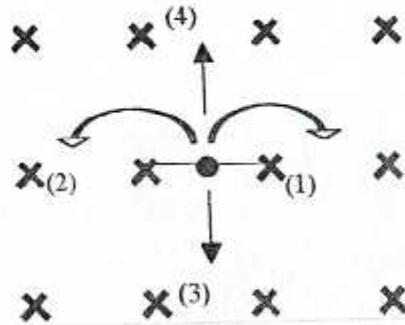


Fig. II-13: Les quatre types de diffusions intra-couche

Notons que ces quatre types de diffusions intra-couche, la configuration du site occupé sélectionné et celle du site voisin occupé après diffusion est Diédrique.

I-3-2-3- Les diffusions inter-couches :

L'originalité de ce travail est l'introduction des événements de saut de marches qui décrivent les diffusions inter-couches des atomes du Gallium et d'Arsenic. Il s'agit d'inventorier les possibilités les plus directes offertes à un atome pour passer d'une couche à une autre. Pour cela, nous avons été amenés à décomposer le saut de marche (événement complexe) en deux événements élémentaires.

La figure (II.14) illustre bien cet événement. Elle montre le cas d'une diffusion de l'atome (1) situé sur la couche supérieure vers un site situé deux couches plus bas. L'atome (1) se trouvant en bord de marche, vient dans sa transition vers la couche inférieure, occuper une position interstitielle(2) pour atteindre ensuite la position (3) qui est une position normale du réseau. La diffusion des atomes des couches inférieures vers les couches supérieures suit le même raisonnement.

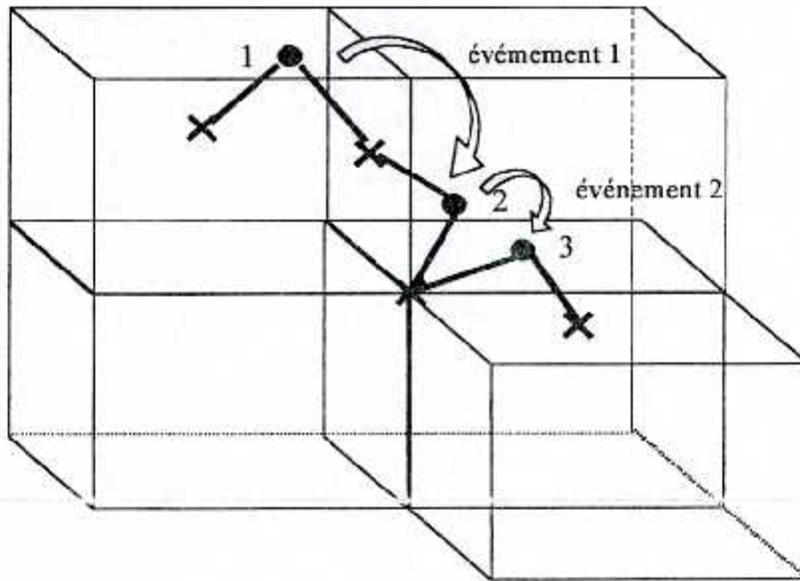


Fig. II-14 : Représentation en 3D d'une diffusion inter-couche par saut de marches décomposé en deux (02) événements élémentaires

Une projection sur le plan (100) du schéma de la figure (II.14) est représentée sur la figure (II.15). Celle ci montre les différentes étapes suivies lors d'une transition inter-couches par saut de marches.

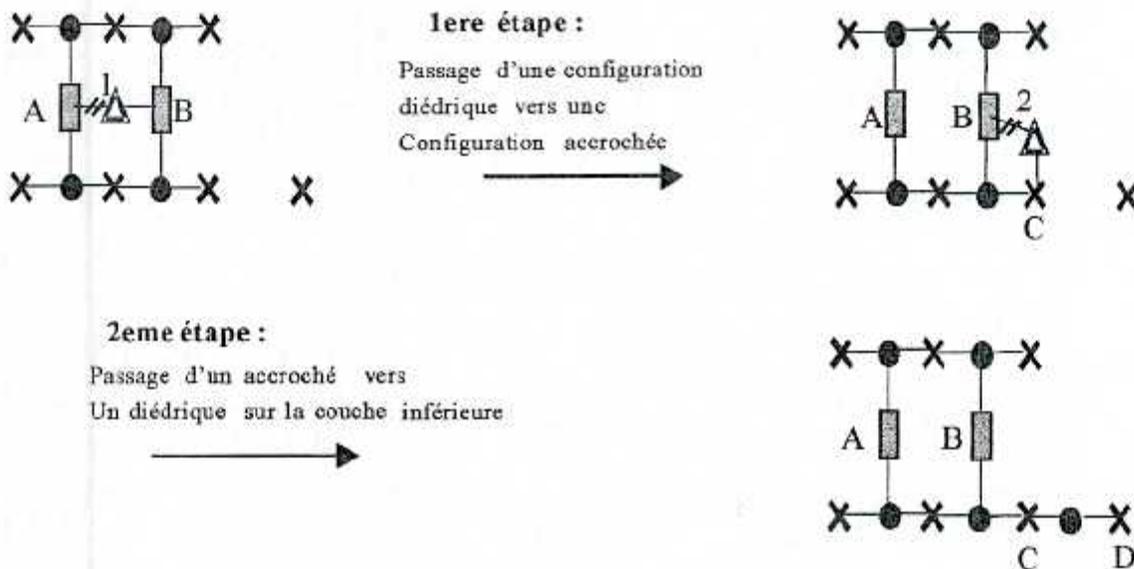


Fig. II-15 : Les deux étapes d'un saut de marche

Sur cette figure, on montre l'existence d'une position intermédiaire 'accrochée' entre l'atome B (deuxième couche atomique de GaAs, 'As') et l'atome C (atome du substrat 'As') qui facilite les diffusions vers les couches supérieures ou inférieures. La distance BC est typiquement celle du tétraèdre régulier.

Le processus est donc le suivant : l'atome de Ga (symbole Δ) de la troisième couche atomique de GaAs, occupant un site au bord d'une marche, casse la liaison numérotée 1 et établit une liaison avec l'atome C. Dans cette position *accrochée*, l'atome est contraint et de ce fait, il rompt la liaison numérotée 2 pour établir une liaison avec l'atome D, en devenant un atome (symbole \bullet) de la première couche.

1-4- Description du modèle énergétique utilisé :

Le modèle énergétique est basé sur les interactions du premier ordre entre les atomes de Gallium (Ga) du groupe III et les atomes d'Arsenic (As) du groupe V du tableau périodique des éléments. Pour le calcul de l'énergie totale d'un adatome dans une configuration donnée, nous faisons l'hypothèse que celle-ci comporte deux contributions qui sont :

✓ *L'énergie chimique*

✓ *L'énergie de contrainte*

1-4-1- Calcul des énergies de liaisons (L'énergie chimique):

Dans le cas d'une structure cristallographique de GaAs du type Zinc Blende, les adatoms sont modélisés selon une forme tétraédrique hybridation SP3 (Appendice C).

Ainsi en retenant que les termes d'interactions entre premiers et seconds voisins, l'énergie de liaison totale d'un adatome de Gallium ou d'Arsenic est [13] :

$$E_{Ga} = n \cdot V_{Ga_As} + m \cdot V_{Ga_Ga} \quad \text{II-4}$$

$$E_{As} = n' \cdot V_{Ga_As} + m' \cdot V_{As_As} \quad \text{II-5}$$

où

V_{Ga_As} : Energie d'interaction entre premiers voisins.

V_{Ga_Ga} , V_{As_As} : Energie d'interaction entre seconds voisins.

$n=n'=2$ et $4 \leq m$ (ou $m') \leq 8$.

n (ou n') représente le nombre de liaisons cation-anion (ou anion-cation) entre premiers plus proches voisins, et m (ou m') représente le nombre de liaisons cation-cation (ou anion-anion) entre seconds proches voisins.

L'énergie d'interaction est supposée être de l'ordre de la chaleur de formation du solide, cette hypothèse fournit une ligne de guide sur le choix du $V_{\text{Ga-Ga}}$, $V_{\text{As-As}}$, et $V_{\text{As-Ga}}$ [38].

Sur le tableau (II.3) sont rassemblées des différentes valeurs des énergies d'interaction données par plusieurs références.

$V_{\text{Ga-Ga}}$ (ev)	$V_{\text{As-As}}$ (ev)	$V_{\text{Ga-As}}$ (ev)	Références
0,1	0,1	0,7	[12][13]
0,17	0,17	0,8	[39]
0,2	0,2	1	[10]
1,005	1,16	1,76	[32]

Tab. II- 3: Les différentes valeurs des énergies d'interactions utilisées dans plusieurs références.

Les énergies d'interactions (énergie chimique) permettent la détermination des énergies d'activations. Dans notre simulateur, ces énergies dépendent de la configuration locale des atomes déposés à travers les termes n , n' , m et m' des relations (II-4) et (II-5).

I-4-2- Calcul de l'énergie de contrainte :

Le calcul de l'énergie de l'adatome en position accrochée a été fait en utilisant le modèle d'interaction de champ de forces de valence (V.F.F). Il est simple et parfaitement adapté aux matériaux de structure zinc blende et diamant [40][41]. De plus, les constantes de force du modèle ont été déterminées dans la littérature pour de nombreux semi-conducteurs [42-44].

Ce modèle conserve la notion de liaison chimique et les déformations des liaisons et des angles pour la détermination des contraintes mécaniques. L'expression complète du modèle V.F.F établie par Musgrave et Pople [45] dans le cas d'une structure zinc blende est très complexe (Appendice D). La formulation simplifiée de Martin [42] de l'énergie de contrainte pour un adatome est exprimée par :

$$E_C = \sum_{i=1}^4 K_r (\Delta r_i)^2 + \sum_{i,j>1}^4 K_\theta (\Delta \theta_{ij})^2 \quad \text{II-6}$$

- k_r et k_θ sont les constantes de forces de compression et de flexion reliées aux constantes élastiques des matériaux.
- Δr_i est la variation de longueur de la liaison i avec $\Delta r_i = (r - r_0)$.
- r_0 est la distance entre proche voisin.
- $\Delta \theta_{ij}$ est l'angle formé entre deux liaisons i et j .

Le premier terme de l'expression (II-6) décrit la variation de la longueur de liaison entre atomes et le deuxième terme traduit la variation d'angle entre les liaisons (flexion).

En absence de toute variation des longueurs de liaisons et en ne considérant que les variations angulaires, l'expression (II-6) se réduit à :

$$E_C = \sum_{i,j>1}^4 K_\theta (\Delta \theta_{ij})^2 \quad \text{II-7}$$

Avec

$k_\theta = 1.1$ ev pour GaAs [42].

En posant $(\Delta \theta_{ij})^2 = (\theta_{ij} - \theta_0)^2$ où θ_{ij} est l'angle après déformation et θ_0 est l'angle à l'équilibre égale à $109^{\circ}28'$, on peut écrire la relation (II-7) comme suit :

$$E_C = \sum_{i,j>1}^4 K_\theta (\theta_{ij} - \theta_0)^2 \quad \text{II-8}$$

Ainsi, nous calculons l'énergie de contrainte pour un atome en configuration accrochée en utilisant l'expression (II-8). Nous avons trouvé une énergie de contrainte $E_C = 1,5$ ev.

I-4-3- Calcul des énergies d'activations ΔE :

En théorie, lors d'un déplacement d'un adatome d'un site à l'autre, la barrière d'énergie ΔE (énergie d'activation) se définit comme la différence entre l'énergie totale de l'état initial et le maximum d'énergie qui est un état intermédiaire (Fig. II-16).

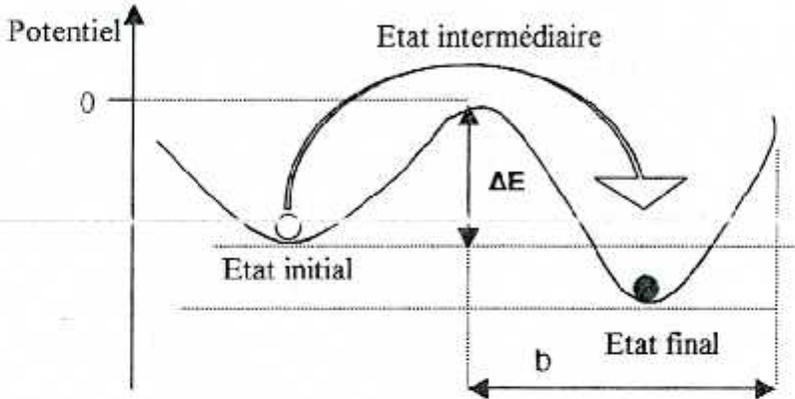


Fig. II-16: Schéma illustrant le passage d'un adatome d'un site vers un autre site [46]

La hauteur de la barrière de potentiel ΔE est de l'ordre de l'électron volt dans le cas du GaAs. La distance « b » entre les barrières de potentiel successives est du même ordre de grandeur que celle entre les mailles cristallines qui est de quelque angströms.

I-4-3-1- Calcul de ΔE dans le cas d'une configuration Diédrique :

Dans le cas où l'adatom est en configuration Diédrique, pour les diffusions intra-couche et les transitions diédrique-accroché, l'énergie d'activation n'est fonction que de l'énergie de liaison de l'adatom avec ses proches voisins. Pour expliciter le principe de calcul de ΔE , prenons l'exemple de la figure (II.17) qui montre la migration à droite d'un adatome de Gallium de la troisième couche.

L'énergie d'activation mise en jeu est alors :

$$\Delta E = E_{\text{Ga}}(\text{Etat Intermédiaire}) - E_{\text{Ga}}(\text{Etat Initial})$$

$$\Delta E = -[V_{\text{Ga-As}} + 2V_{\text{Ga-Ga}}] + [2V_{\text{Ga-As}} + mV_{\text{Ga-Ga}}]$$

$$\Delta E = V_{\text{Ga-As}} + (m - 2) V_{\text{Ga-Ga}}$$

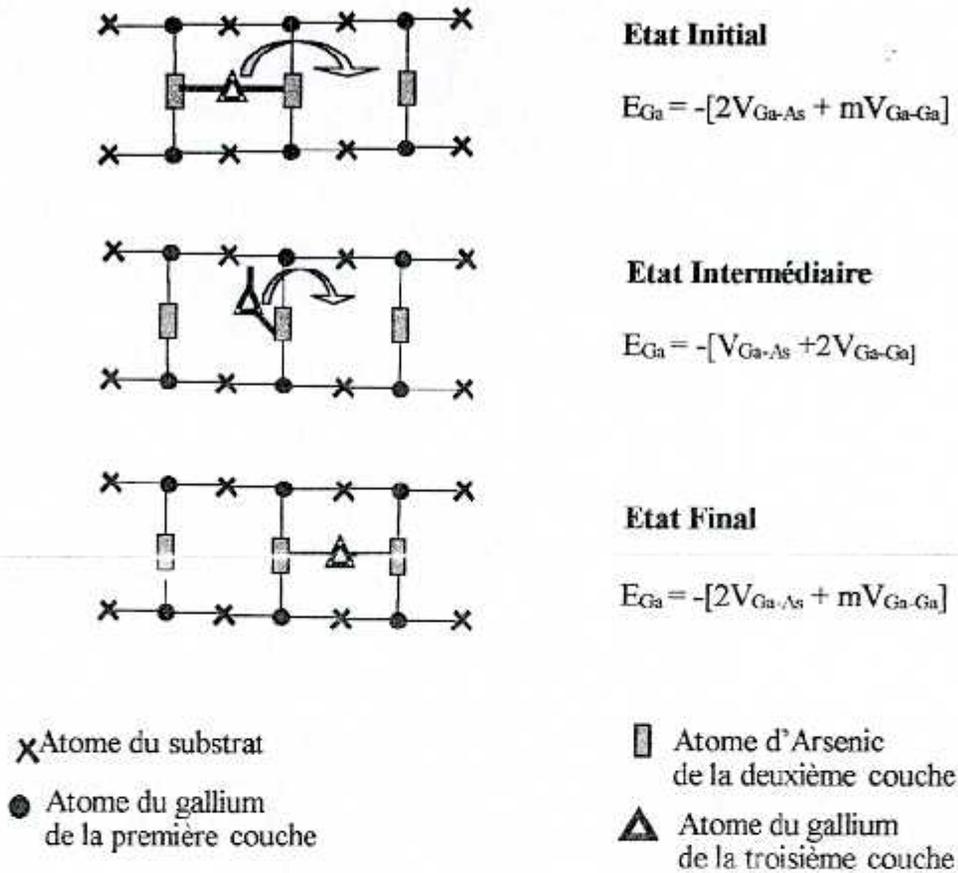


Fig. II-17 : Etapes de calcul de l'énergie d'activation pour une diffusion à droite d'un adatome de Gallium.

I-4-3-2- Calcul de ΔE dans le cas d'une configuration Accrochée :

Dans cette configuration, l'adotome est en position contrainte et l'énergie d'activation des diffusions inter-couches correspondant à un passage d'une configuration Accrochée à une configuration Diédrique. La figure (II.18) montre le cas d'une diffusion d'un adotome de Gallium en configuration Accrochée vers la couche inférieure.

L'énergie d'activation mise en jeu est alors :

$$\Delta E = E_{Ga}(\text{Etat Intermédiaire}) - E_{Ga}(\text{Etat Initial})$$

$$\Delta E = -[V_{Ga-As} + 2V_{Ga-Ga}] + [2V_{Ga-As} + (3 + B)V_{Ga-Ga}] - E_C$$

$$\Delta E = [V_{Ga-As} + (1+B)V_{Ga-Ga}] - E_C$$

Si le site (a) est vide B égale 0, si il est occupé par un atome de Gallium alors la valeur de B=1.

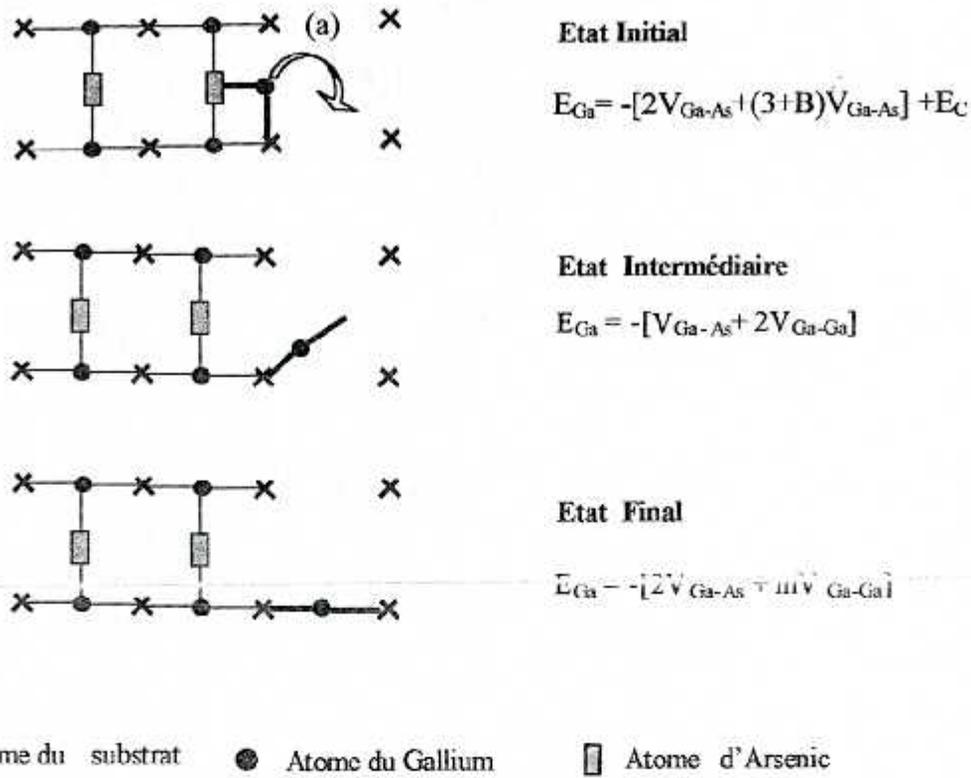


Fig. II-18 : Etapes de calcul de l'énergie d'activation pour un passage d'une configuration Accrochée à une configuration Diédrique

II- METHODE DE MONTE CARLO POUR PROBLEME PROBABILISTE :

La manipulation des nombres aléatoires est la procédure de base de la méthode de Monte Carlo. Pour un problème probabiliste, l'approche de Monte Carlo consiste à manipuler des nombres aléatoires choisis de telle façon qu'ils simulent le processus physique aléatoire du problème étudié [47][48].

Dans notre modèle de simulation, nous avons envisagé une approche probabiliste basée sur la méthode de Monte Carlo pour la gestion de l'aspect aléatoire des événements ayant lieu sur la surface de croissance. Le temps d'occurrence de chaque événement est régi par la loi de Poisson [11] :

$$t_i = -\frac{1}{R} \text{Log}(z_i) \tag{II-9}$$



Où z_i est un nombre réel aléatoire variant entre 0 et 1 et R est la probabilité de réalisation d'un événement en surface tel que : l'adsorption, les diffusions intra-couche (diffusion à droite, à gauche, vers l'avant et l'arrière) et les diffusions inter-couches (diffusion vers les couches inférieures et vers les couches supérieures)

II-1- Générateur des nombres pseudo-aléatoires :

Une génération des nombres pseudo-aléatoires et uniformes est obtenue en utilisant des formules mathématiques itératives. L'algorithme le plus utilisé est de forme modulaire multiplicative [47] [49]. Une suite pseudo-aléatoire peut être engendrée par la relation de récurrence suivante :

$$N_{i+1} \equiv L \times N_i \pmod{M} \quad \text{II-10}$$

N_i : est le nombre aléatoire généré à la $i^{\text{ème}}$ itération.

Les valeurs de L et M sont choisies de telle façon à obtenir un maximum d'uniformité et d'indépendance des nombres générés alors que N_0 est un nombre positif impair.

La formule (II-10) caractérise ce que l'on appelle les «méthode de congruence multiplicative» de génération des nombres pseudo-aléatoires [49]. Une telle suite se répétera elle-même après au plus M termes et sera donc périodique. On doit toujours s'assurer que la période est supérieure aux nombres aléatoires nécessaires à une seule expérience.

Le cas le plus fréquent est $M = 2^b$ car les calculs arithmétiques peuvent alors être faits très aisément sur un calculateur. Travaillant en numération binaire (multiplication faible), b étant généralement au voisinage de 30 ou 40. L'équation II-10 donne alors une période de $M/4$ à condition que L soit de forme $8 \times t + 3$, t étant un entier.

Pour notre modèle nous avons choisi $b=31$, nombre nous paraissent suffisant pour une période non renouvelable d'un tirage qui dépasse $5 \cdot 10^8$ nombres générés (Appendice E).

Nous avons effectué un test sur un échantillon des nombres générés, pour examiner l'uniformité des nombres aléatoires. Nous avons pris N_0 égale à 5 et b égale 31

Ainsi nous avons reparti l'intervalle $[0, 1]$ en vingt sous intervalles, puis nous avons comptabilisé la proportion des nombres aléatoires dans chacun des vingt sous intervalles, comme le montre la figure (II.19)

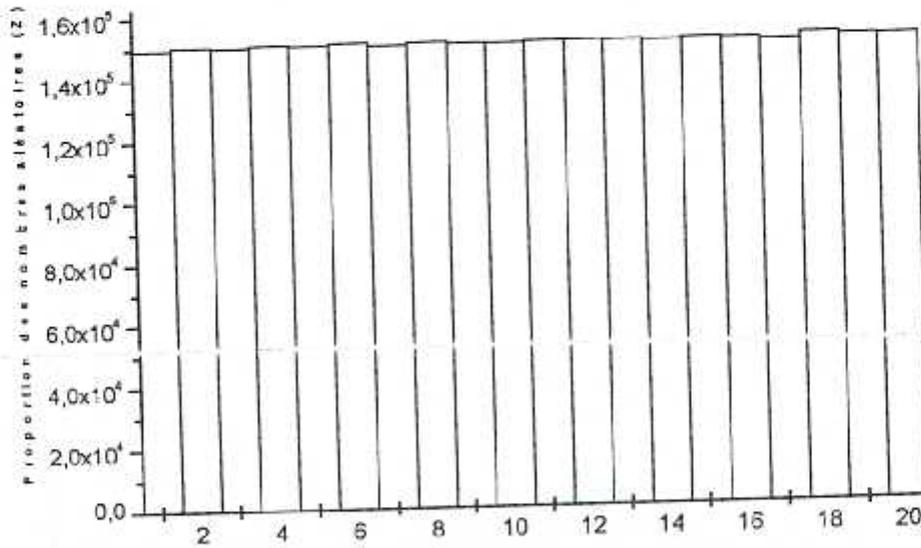


Fig. II-19 : Test de l'uniformité des nombres aléatoires (tirage de 3×10^6 nombres)

Sur la figure (II.19) nous remarquons que la distribution des nombres aléatoires dans chaque sous intervalle ne présente qu'une faible fluctuation par rapport à la moyenne qui ne dépasse pas 0,5%. Ce qui nous permet donc de considérer la génération de nombres aléatoires du modèle utilisé comme étant uniforme.

III- LA SIMULATION :

Notre simulateur «SimGaAS2» de la croissance cristalline de quatre couches monoatomiques GaAs/ GaAs (100) s'articule comme le montre la figure II-20 sur trois modules essentiels :

- Module d'Entrée.
- Module de Base.
- Module de Sortie.

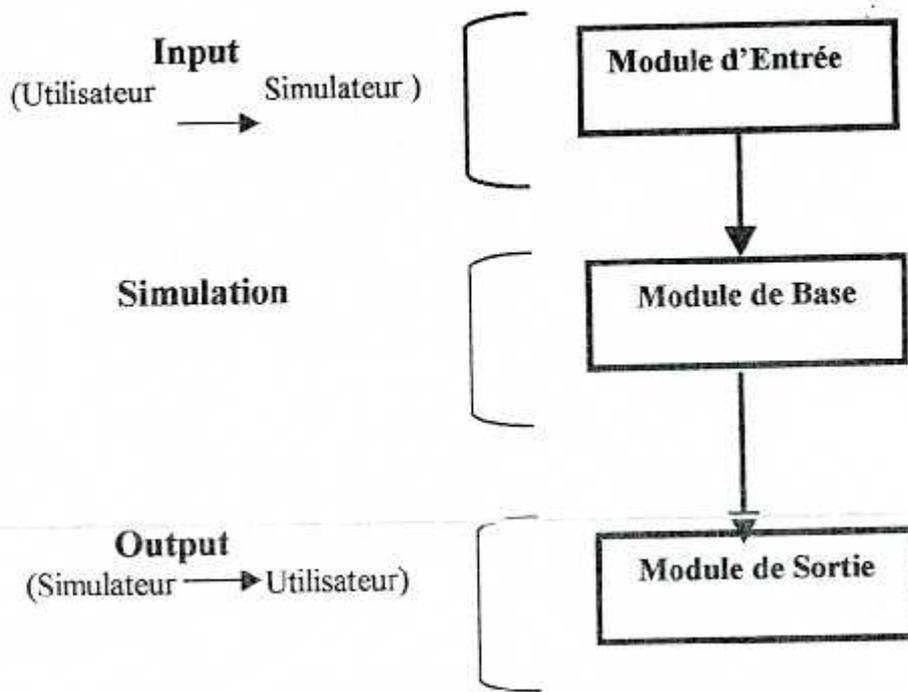


Fig. II-20 : Les trois modules essentiels du simulateur

III-1- Module d'Entrée :

Le module d'entrée de notre simulateur est composé de deux niveaux :

A/ Niveau physique : où sont introduits les paramètres physiques tels que :

- ✓ La température T de croissance de GaAs/GaAs (100)
- ✓ Les pressions partielles des flux incidents : P_{As_2} et P_{Ga} (ou α_{Ga} et α_{As})
- ✓ La fréquence de vibration des atomes adsorbés $\nu_0 = 3 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$
- ✓ Les énergies d'interaction V_{Ga-Ga} , V_{As-As} et V_{Ga-As} (Tab III-1)
- ✓ Le temps final du dépôt t_f (quelques secondes)

B/ Niveau géométrique : où sont introduits l'orientation cristallographique initiale du substrat, le nombre de site du substrat pour définir sa taille et le paramètre de maille de GaAs.

III-2- Module de Base :

Ce module permet la gestion événementielle de l'adsorption des atomes et molécules provenant de la phase gazeuse, ainsi que les diffusions en surface des atomes de la phase solide en tenant compte des énergies de diffusion qui dépend de l'environnement de l'atome.

III-2-1- Gestion des Arrivées :

III-2-1-1- Traitement des deux calendriers des Arrivées :

Après que les deux calendriers du temps des Arrivées (Cal.Ga et Cal.As) sont établis par la formule (II-9), nous sélectionnons le temps minimum (T_{min}) et le site d'impact correspondant (isc), le minimum des temps définit la nature de l'Arrivées qui aura lieu (Fig. II-21).

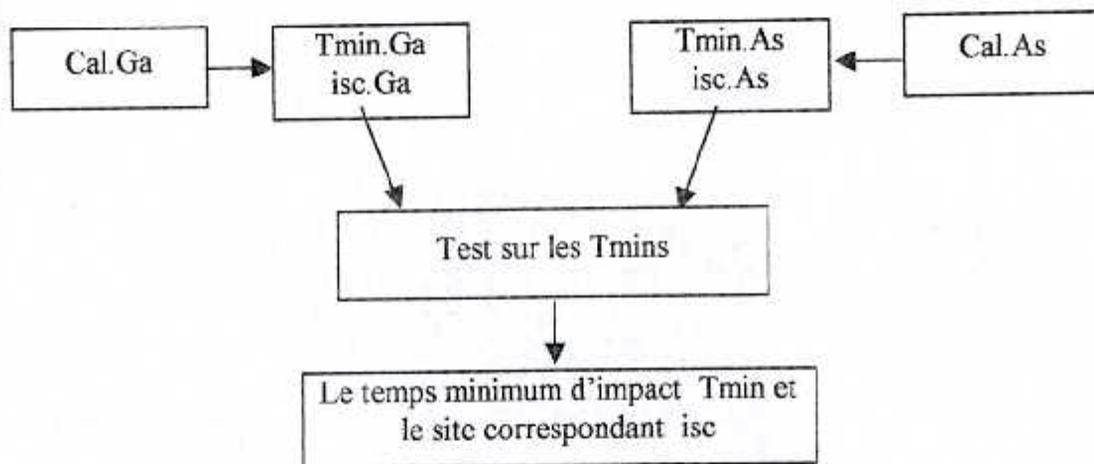


Fig. II-21 : Gestion des deux calendriers d'Arrivées Cal.Ga et Cal.As

III-2-1-2- Réactualisation du calendrier des Arrivées :

Après que le temps minimal (T_{min}) soit sélectionné et que le site correspondant (isc) est déterminé, nous procéderons à une remise à jour du calendrier des Arrivées. Le temps réactualisé sera alors donné par l'expression suivante :

$$t(isc) = T_{min}(isc) - \frac{1}{\lambda} LnZ_i \quad \text{II-11}$$

isc : le site d'impact choisi

$t(isc)$: le temps réactualisé au site choisi

$Tmin$: le temps minimal sélectionné au site choisi

Z_i : nombre aléatoire uniformément réparti sur $[0, 1]$

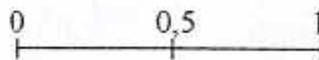
λ : probabilité de réalisation d'un événement Arrivée. Son expression est donnée par l'équation II-2.

III-2-1-3- Configuration des Arrivées:

La configuration consiste à représenter l'évolution de la couche adsorbée après l'occurrence d'un événement. Ainsi après la réalisation de chaque événement, il faut remettre à jour la configuration du cristal. Cette configuration est caractérisée par trois (03) matrices :

1. La matrice des occupations "Occ" qui décrit l'état d'occupation du site.
2. La matrice des liaisons qui donne le nombre de liaison libres de chacun des atomes adsorbés. Elle est symbolisée par la variable $NLL(i, nc)$, i étant le site d'adsorption et nc le numéro de couche.
3. La matrice de numéro de couche "Numcouche" elle représente l'altitude du site.

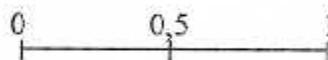
L'adsorption d'un atome du Gallium venant de la phase gazeuse se fait sur un site vide, alors qu'une Arrivée d'Arsenic (As_2), étant donné la nature moléculaire de l'Arsenic, le site sélectionné pour l'adsorption de la molécule As_2 doit avoir un site voisin vide, en cas de présence de deux configurations équiprobables on fait appel au générateur des nombres aléatoires (GENERA) pour définir le site adjacent à occuper par la molécule (As_2), cette procédure est illustrée sur la figure ci-contre.



si $z_i \in]0, 0.5]$ le site choisi est le voisin arrière.

si $z_i \in]0.5, 1]$ le site choisi est le voisin avant.

De même, on procédera pour désignation le site adjacent au site choisi entre le site voisin gauche et voisin droit.



si $z \in]0, 0.5]$ le site choisi est le voisin droit.

si $z \in]0.5, 1]$ le site choisi sera le voisin gauche.

III-2-2- Gestion des Hors Arrivées :

III-2-2-1- Les Sites à Probabilités Modifiées (S.P.M) :

Lorsqu'un atome est déposé sur la surface, il change les conditions de son environnement. Il bloque, par exemple, la diffusion d'un atome voisin. Ce ci nous amène à parler des Sites à Probabilités Modifiées (S.P.M). Ces S.P.M sont comptabilisés après chaque événement. Ensuite, les événements probables sont déterminés pour chacun de ces sites.

Cette procédure de recherche des S.P.M nous évite de recalculer les probabilités de transition et donc les temps correspondants aux atomes qui ne sont affectés en aucune façon par l'événement en cours. Ceci nous permet ainsi d'économiser le temps de calcul sans être moins précis.

III-2-2-2- Exemple de recherche de S.P.M :

Une manière simple d'introduire la notion ce qu'est un Site à Probabilité Modifiée (S.P.M) est de suivre une configuration locale dans le temps. Nous avons sur la figure (II 22), une configuration prise au temps t_i et à t_{i+1} , l'atome de Gallium du site 9 de la première couche subit une diffusion à droite. Il s'agit alors d'énumérer les sites occupés qui sont concernés directement par cette diffusion à droite.

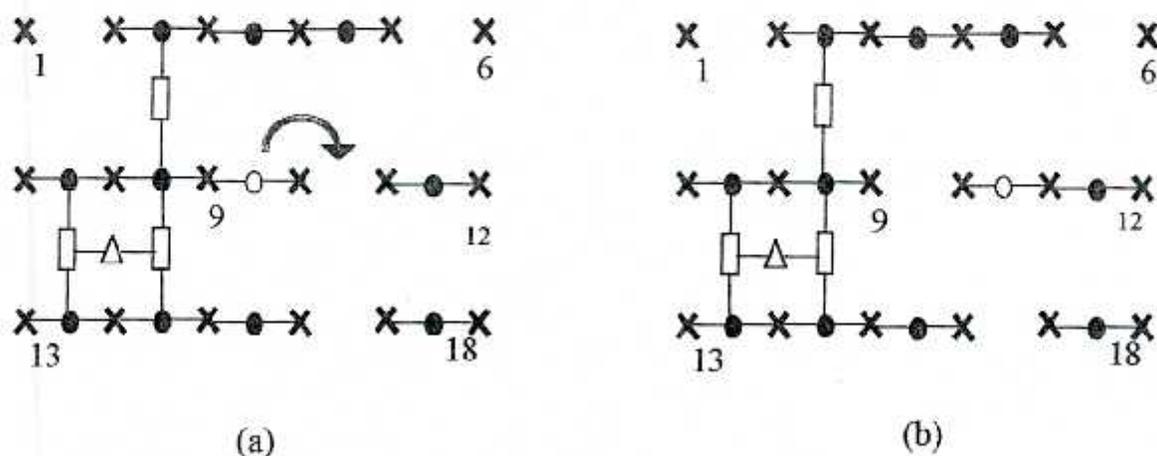


Fig. II-22 : Schéma illustrant un exemple pour déterminer des sites à probabilités modifiées Pour une diffusion droite :

(a) : Configuration locale de surface à l'instant t_i , avant la diffusion

(b) : Configuration locale de surface à l'instant t_{i+1} après la diffusion

L'exemple de figure (II.22), donne les sites suivants : 2, 3, 4, 7, 11, 15 comme Sites à Probabilités Modifiées. Ces sites ont tout enregistré une possibilité de transition de plus ou de moins : par exemple, une fois que l'atome du site 9 a diffusé à droite, l'atome d'Arsenic de la deuxième couche du site 2 ne peut plus diffuser à droite. Par contre l'atome de Gallium de la troisième couche qui occupe le site 7 peut passer en accrochée par saut de marche. Le site 7 a donc une possibilité de plus et le site 2 une possibilité en moins.

III-2-2-3- Recherche des événements probables pour un site à probabilité modifiée :

Chaque événement modifié l'environnement de l'atome en mouvement par un changement des paramètres n et m définissant respectivement le nombre de liaisons de chaque site à probabilité modifiée avec ses premiers et seconds voisins. Ainsi, après chaque événement, nous déterminerons les énergies d'activation correspondants à chaque S.P.M, et par là, un calcul des nouvelles probabilités de réalisation de tous les événements possibles est effectué.

Nous donnons un exemple sur la figure (II.23), où nous dénombrons les événements probables pour l'atome (A) déposé.

Six événements sont probables dans l'exemple cité. Cette recherche se fait pour chaque site à probabilité modifiée.

06 événements probables pour l'atome A :

- 1-évaporation
- 2-diffusion à droite
- 3-diffusion vers l'avant
- 4-diffusion vers l'arrière
- 5-passage Dié-Accr3
- 6-passage Dié-Accr4

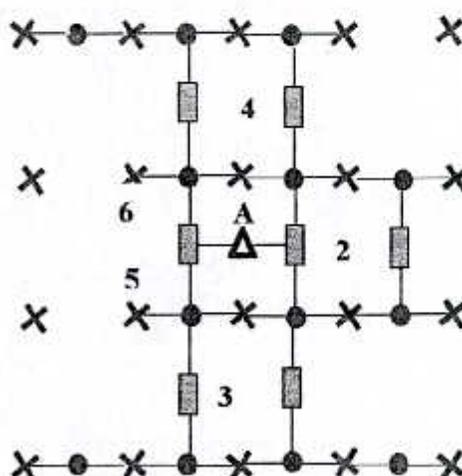


Fig. II-23 : Evénements probables pour l'atome A.

III-2-3- Synthèse de déroulement de la croissance :

L'évolution de la configuration de la couche épitaxiée se fait par les événements d'une manière atomique. De ce fait, les mouvements en surface sont une suite d'événements élémentaires où il n'y a pas de mouvement collectif. Nous pouvons décrire le processus d'une manière succincte. A chaque événement, il y a reconfiguration de la surface. Donc de nouvelles positions atomiques sont déterminées par un nouveau calcul de l'énergie minimale.

Ainsi nous pouvons résumer un cycle de Monte Carlo, qui est un enchaînement des différents événements, par les étapes suivantes :

- 1- Le premier événement produit dans la simulation est le dépôt d'un atome de Gallium sur le substrat stabilisé Arsenic. Cet atome est positionné dans un site du réseau parfait.
- 2- Une nouvelle configuration locale est produite.
- 3- Un nouveau temps d'occurrence est calculé relatif aux événements « Hors Arrivée » possibles : diffusions, évaporation, passage en accroché. C'est l'événement de temps minimum qui est retenu.
- 4- Tous les temps minimums calculés pour chaque atome adsorbé seront classés sur le calendrier des événements «Hors Arrivées».
- 5- L'événement le plus probable en surface sera l'événement correspondant au temps minimal (T_{min}) sur l'ensemble des adatoms de toute la surface.
- 6- L'étape finale se fait par comparaison du temps minimal (T_{min}) avec le temps d'Arrivée prochaine ($T_{min\ pro}$).
 - Si $T_{min} < T_{min\ pro}$, alors le prochain événement sera un événement «Hors Arrivée ».
 - Si $T_{min} = > T_{min\ pro}$, alors le prochain événement sera un événement «Arrivée ».

Ce cycle est répété à l'occurrence de chaque événement

III-3- Module de Sortie :

Les résultats de notre simulateur « SimGaAs2 » sont présentés, selon le besoin, sous forme :

- Représentation Numérique
- Représentation Statistique
- Représentation Morphologique

III-3-1- Représentation numérique :

La forme numérique représente les résultats de la croissance, sous forme :

- D'un fichier de résultats événementiels qui présente tous les événements ayant lieu sur la surface en précisant le numéro d'ordre, le type d'événement et son site d'impact. Ces résultats sont affichés dans un tableau de quatre colonnes :
 - 1- La colonne « **clich** »(Cliché) : affiche le numéro d'ordre de l'événement qui est réalisé, c'est un paramètre qui comptabilise le nombre d'événements réalisés.
 - 2- La colonne « **T_c** » : c'est le temps d'occurrence d'un événement ou le moment de réalisation de l'événement en cours.
 - 3- La colonne « **Evenm** » « **Evénement** » : affiche le type d'événement réalisé. A chaque type d'événement est affectée une valeur, (voir l'appendice B).
 - 4- La colonne « **Sc** »(Site **Choisi**) : cette colonne affiche le site d'occurrence de l'événement qui est réalisé.
- Une sortie pour le taux de couverture : cette sortie est matérialisée par un tableau qui affichera le nombre d'atomes de Gallium et d'Arsenic adsorbés en surface et le taux de couverture en pourcentage à chaque instant de croissance.

III-3-2- Représentation Statistique :

Cette représentation consiste à tracer la variation des proportions des types d'événements en fonction du temps. Cette sortie se résume par le tracé des histogrammes.

III-3-3- Représentation Morphologique :

Ce type de résultat nous a permis de visualiser parfaitement la croissance In-Situ des quatre couches atomiques. Un exemple de présentation bidimensionnelle de cette morphologie est illustrée par les figures (III-31) et (III-32) du chapitre III.

IV- STRUCTURE GENERALE DU PROGRAMME SIMGaAs2 :

SIMGaAs2 est constitué d'un programme principal et de plusieurs sous-programmes. Chacun de ces derniers s'occupe d'une tâche bien spécifique. Sa structure est illustrée par la (Fig. II-24).

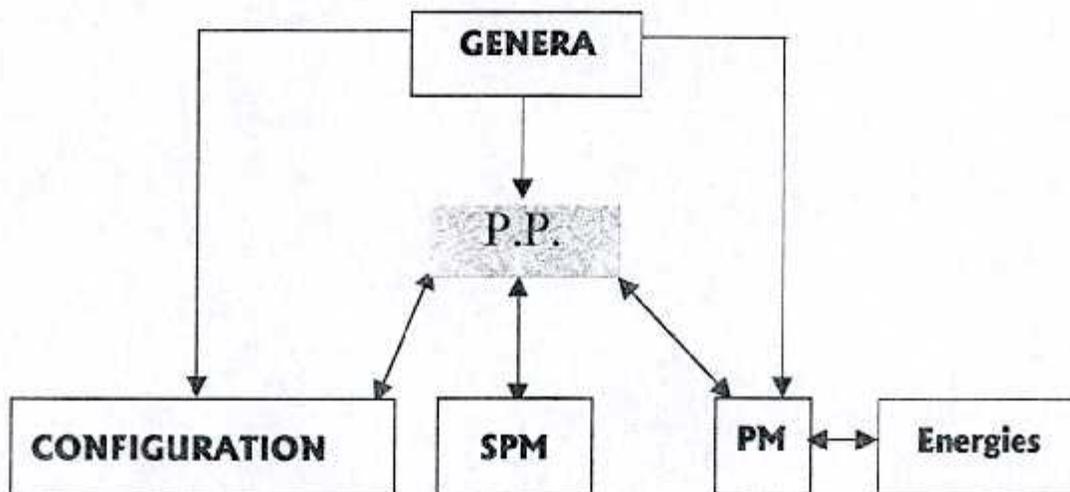


Fig. II-24 : Diagramme illustrant les différentes communications entre les sous-programmes et le programme principal.

PP : Programme Principal.

GENERA : sous programme de générateur des nombres aléatoires.

CONFIGURATION : sous programme décrivant la configuration de la croissance.

SPM : sous programmes pour le calcul des Sites à Probabilités Modifiées.

PM : sous programme pour la recherche des Probabilités Modifiées.

Energie : sous programme pour le calcul des Energies.

IV-1- Programme principal :

Le programme principal est un programme permettant :

- La lecture des données.
- L'allocation et désallocation de la mémoire, vu le nombre très important des matrices utilisées.
- La détermination de deux calendriers du temps, un pour le Gallium (Ga) et l'autre pour l'Arsenic (As).
- Le calcul du minimum des temps des deux calendriers.
- La réactualisation du calendrier pour le site d'impact.
- il assure la communication entre les différents sous-programmes pour un bon déroulement de la croissance.

IV-2- Catégories de Sous Programmes :

➤ **INITIAL . cpp** : ce sous programme permet la mémorisation de la structure initiale de la surface du substrat, la détermination du voisinage de chaque site. Pour conserver les propriétés du cristal infini, les conditions aux limites périodiques de la surface sont aussi appliquées.

➤ **GENERA . cpp**: est un programme de génération des nombres aléatoires uniformément répartis sur l'intervalle [0,1].

➤ **CONFIGURATION** : C'est un ensemble de 48 sous programmes, qui sont désignés dans le guide de l'utilisateur par les noms suivants :

ConfigEven1 .cpp, ConfigEven2 .cpp, ..., ConfigEven48.cpp

Ces sous programmes permettent de reconfigurer la surface de la couche de dépôt après l'occurrence de chaque événement.

➤ **SPM** : C'est un groupe de 48 sous programmes désignés dans le guide de l'utilisateur par les noms :

SPMEven1.cpp, SPMEven2.cpp, ..., SPMEven48.cpp

permettant la recherche des sites à probabilités modifiées lorsqu'un événement aura lieu.

- **PM :** Chaque type d'occupation des sites à probabilités modifiées possède un sous programme de PM désignés dans le guide de l'utilisateur par les noms :

PMDeidriqueGa.cpp, PMDeidriqueAs.cpp,
PMAccrochéGa1.cpp ..., PMAccrochéGa4.cpp,
PMAccrochéAs1.cpp ..., PMAccrochéAs4.cpp.

Ces sous programmes permettant de recalculer les nouvelles probabilités des sites comptabilisés par le programme SPM.

- **Energie :** C'est un ensemble de sous programme qui calculent les énergies relatives à chaque événement.

V- ORGANIGRAMME GENERAL DE SIMGaAs2 :

Le déroulement de la croissance homoépitaxiale de quatre couches atomiques de GaAs/GaAs (100) suit généralement l'organigramme de la (Fig. II-25).

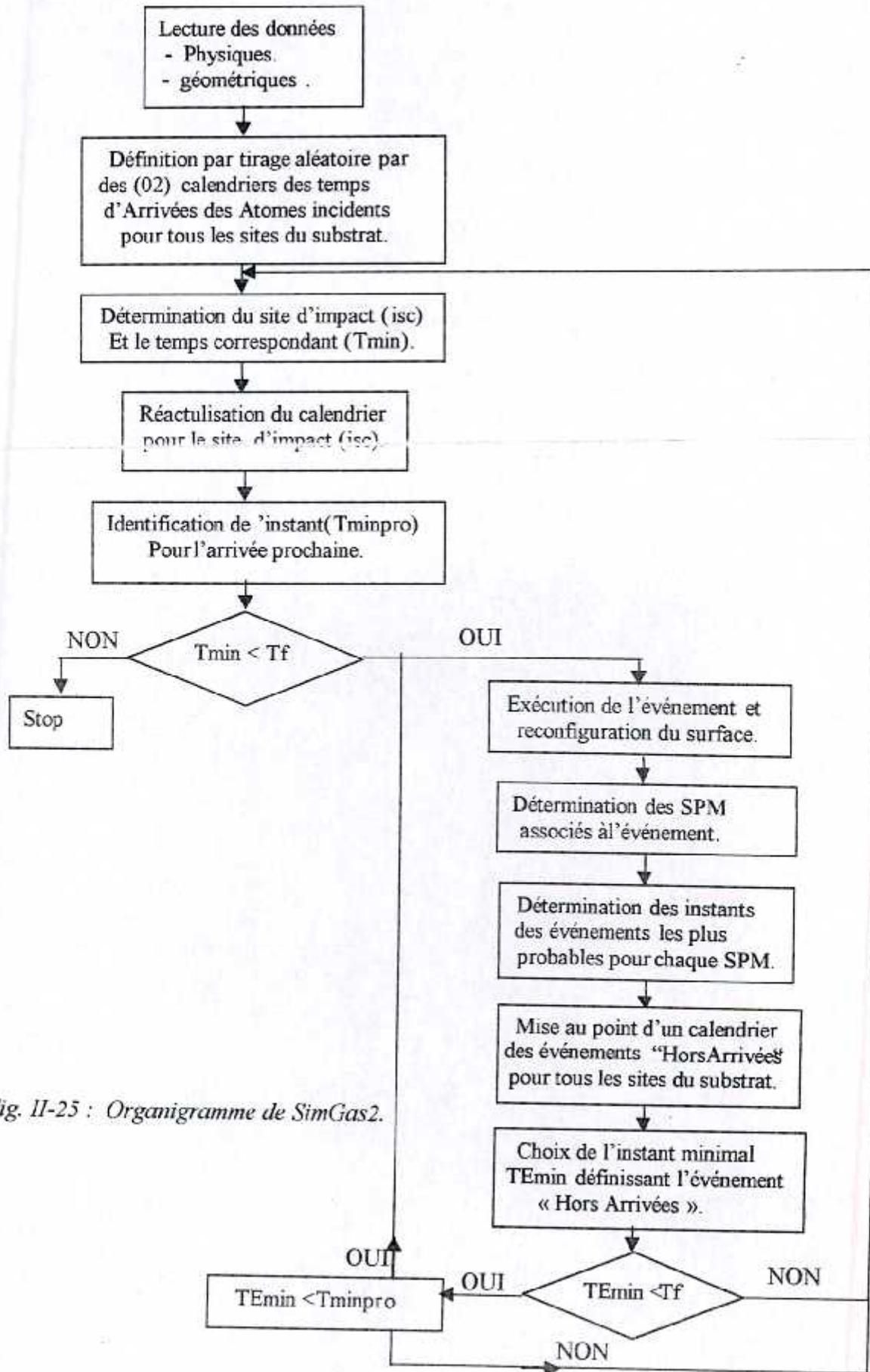


Fig. II-25 : Organigramme de SimGas2.

Chapitre III

Résultats et Discussions

INTRODUCTION

Dans ce dernier chapitre, nous présentons les résultats obtenus par la mise en oeuvre de notre modèle de simulation de la croissance cristalline de quatre couches monoatomiques de GaAs sur une surface GaAs (100).

Nous présenterons les paramètres caractérisant le phénomène de diffusion intra-couche et inter-couche des adatoms de Gallium tels que la longueur moyenne de diffusion (l_{moy}) et le coefficient de diffusion (D_{Ga}) des adatoms de Gallium.

Nous illustrerons aussi l'influence de la température de croissance et de la pression des flux incidents sur l'évolution du taux de couverture de la surface, la rugosité de la surface, la densité de marches en surface et le comportement de l'intensité RHEED lors de la croissance.

I- CONDITIONS ET PARAMETRES DE LA SIMULATION :

Parmi les exigences auxquelles doit répondre notre simulation, il en est des conditions que nous résumons ainsi:

- La surface de croissance des couches de GaAs (100) : est une surface plane et stabilisée Arsenic.
- La distinction entre les deux types d'atomes, représentant les atomes d'Arsenic (As) et ceux du Gallium (Ga), se fait dans notre simulateur, par le numéro de la couche sur laquelle ils s'adsorbent. Comme nous partons d'une surface terminée Arsenic, l'arrivée des atomes de Gallium (Ga) se fera sur les couches impaires (numérotées 1 ou 3) et celle de l'Arsenic (As) sur les couches paires (numérotées 2 ou 4).
- La température T_s du substrat : est choisi dans la gamme [530°C - 620°C] où d'une part expérimentalement l'adsorption des molécules d'Arsenic (As_2) est dissociative (dissociation de la molécules As_2 et chimisorption de ses radicaux dès son adsorption sur la surface) et d'autre part l'évaporation du Gallium est négligeable [50-51].
- La fréquence ν_0 : de vibration des atomes adsorbés intervenant dans la relation d'Arrhenius

$$R = \nu_0 \exp\left(\frac{-\Delta E}{KT}\right)$$

est prise égale à $3 \cdot 10^{12}$ Hz [51-52].

- **Les énergies d'interaction** entre les atomes premiers et seconds voisins $V_{\text{Ga-As}}$, $V_{\text{Ga-Ga}}$ de Gallium et $V_{\text{As-Ga}}$, $V_{\text{As-As}}$ de l'Arsenic sont rassemblées sur le tableau (III.1).

Energie d'interaction	Valeurs (ev)	Références
$V_{\text{Ga-Ga}}$	0.16	[53]
$V_{\text{As-As}}$	0.2	[53]
$V_{\text{Ga-As}}$	1.7	[54][55]

Tab. III-1 : Les différentes énergies d'interaction entre l'Arsenic et le Gallium utilisées dans notre simulateur « SimGaAs2 ».

Nous avons évalué l'énergie de contrainte E_C de l'atome en configuration Accrochée à travers le modèle V.F.F. Nous avons trouvé une énergie d'environ $E_C = 1,5$ ev.

- **L'intensité du flux** J_X des atomes (ou molécules), provenant de la phase gazeuse donné par la relation suivante :

$$J_X = 3,5 \times 10^{23} \frac{P_F}{\sqrt{M_X \cdot T_F}} \quad \text{III-1}$$

X est l'espèce adsorbée Gallium ou Arsenic

M_X est la masse molaire de l'espèce adsorbée (en gramme)

T_F est la température du gaz incident (en degré Kelvin)

P_F est la pression du gaz incident (en Torr)

est introduite dans notre simulateur, sous forme d'un paramètre α_X :

$$\alpha_X = J_X \cdot \sigma_X \quad \text{III-2}$$

où

σ_X est la surface d'un site d'impact de l'espèce adsorbée 'X' (exprimée en centimètre carré)

- **La durée de la croissance** t_f est de l'ordre de la seconde.
- **La dimension de la surface** du substrat simulée est (30 × 30) sites.

II- MINIMISATION DES FLUCTUATIONS STATISTIQUES ASSOCIEE A LA SIMULATION DE MONTE CARLO :

L'évolution temporelle du taux de couverture $\vartheta(t)$ de la première couche de Gallium tracée pour trois séries ou chemins différents de nombres aléatoires correspondant à $N=5$, $N=11$ et $N=21$, est représentée sur la figure (III.1a) dans le cas d'un substrat de dimension (10×10) sites.

Sur cette figure, on voit clairement l'importante fluctuation des courbes $\vartheta(t)$ par rapport à leur moyenne. Les fluctuations désordonnées caractérisent la dispersion des valeurs du taux de couverture $\vartheta(t)$ autour d'une valeur moyenne $\vartheta_{\text{moy}}(t)$ et sont calculées par le formalisme de l'écart quadratique moyen σ [56] :

$$\sigma = \left[\frac{1}{3} \left(\sum_{i=1}^3 (\vartheta_i - \vartheta_{\text{moy}}) \right)^2 \right]^{1/2} \quad \text{III-3}$$

où

ϑ_i est le taux de couverture suivant le chemin aléatoire i

ϑ_{moy} est la moyenne de couverture effectuée sur trois chemins aléatoires

En répétant la même expérience de simulation sur des dimensions de plus en plus élevées (Fig. III-1), le taux de fluctuation (Tab. III-2) diminue de 1,4% dans le cas d'un substrat de dimension (10×10) à 0,75% pour un substrat de (30×30) sites qui représente, selon certains auteurs [31] et les travaux de A.Madhukar et al [11], la taille minimale de l'échantillon simulé entraînant la convergence des résultats avec ceux obtenus expérimentalement. Afin que les résultats soient convergents dans un temps de calcul raisonnable sur PC, nous avons choisi pour toutes nos expériences de simulation une taille de (30×30) sites

Taille de substrat	Ecart quadratique moyen σ
10 × 10 sites	1,4%
15 × 15 sites	1,01%
20 × 20 sites	0,84%
30 × 30 sites	0,75%

Tab. III-2 : Les fluctuations statistiques pour différentes tailles de substrat

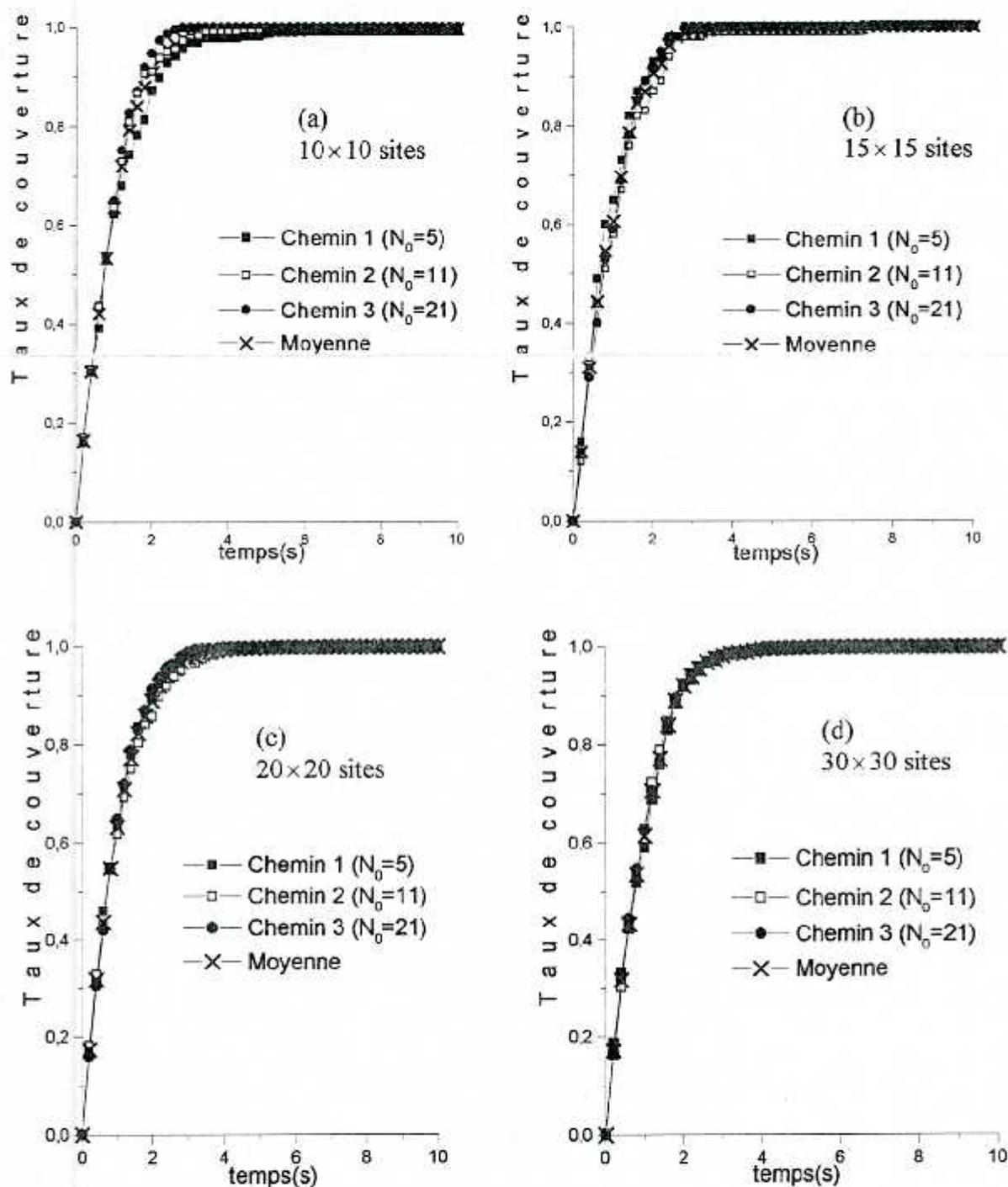


Fig. III-1 : Evolution du taux de couverture pour $T=530^\circ\text{C}$ et un rapport de flux As/Ga = 9
Le taux de couverture est tracé pour trois chemins aléatoires différents

III- ETUDE DE L'EVOLUTION DE LA COUVERTURE :

III-1- Mécanisme de croissance :

Dans le cas d'un mécanisme de croissance multicouches, le taux de couverture $\theta(t)$ d'une surface a été formulé théoriquement par Kaschiev [57]:

$$\theta(t) = \left[1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \right]^m \tag{III-4}$$

$$\tau = \left(\frac{1}{\pi \rho g v_r} \right)^{\frac{1}{3}} \tag{III-5}$$

m est un entier égal à 1 ou 3

g est le taux de germination (cm/s^2)

ρ est le nombre de sites par unité de surface du substrat (cm^{-2})

v_r est la vitesse radiale de la croissance (cm/s)

La figure (III.2) donne une représentation graphique de $\theta(t)$ dans les deux cas $m=1$ et $m=3$

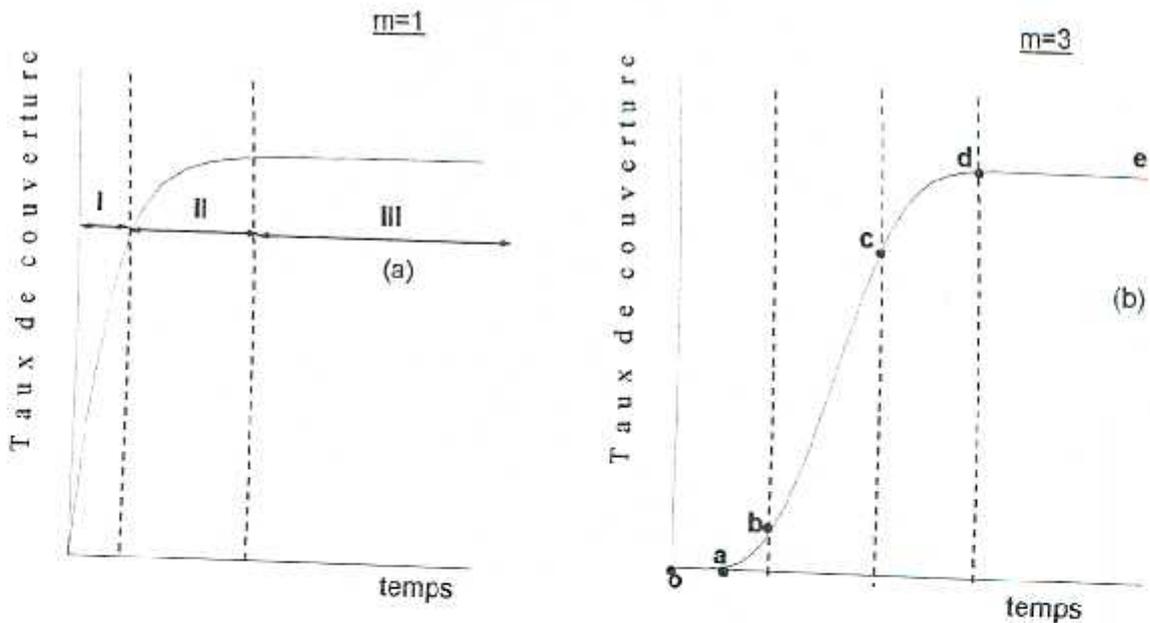


Fig. III-2 : l'évolution théorique du taux de couverture pour $m=1$ et $m=3$ en fonction de temps
 (a) : Taux de couverture pour $m=1$.
 (b) : Taux de couverture pour $m=3$.

En comparant l'allure de ces courbes avec celles obtenues par notre simulateur (Fig. III-3), confirmée par les travaux de A.Madhukar et al [58] sur la croissance de GaAs basé sur le modèle CDRI (Configuration Dependent Reactive Incorporation)(Fig. III-4), nous constatons que l'évolution de la première couche suit la loi donnée par la relation III-4 avec ($m=1$), et m égale 3 pour les couches supérieures (la 2^{ème}, 3^{ème}, ,16^{ème} couche) de GaAs (100).

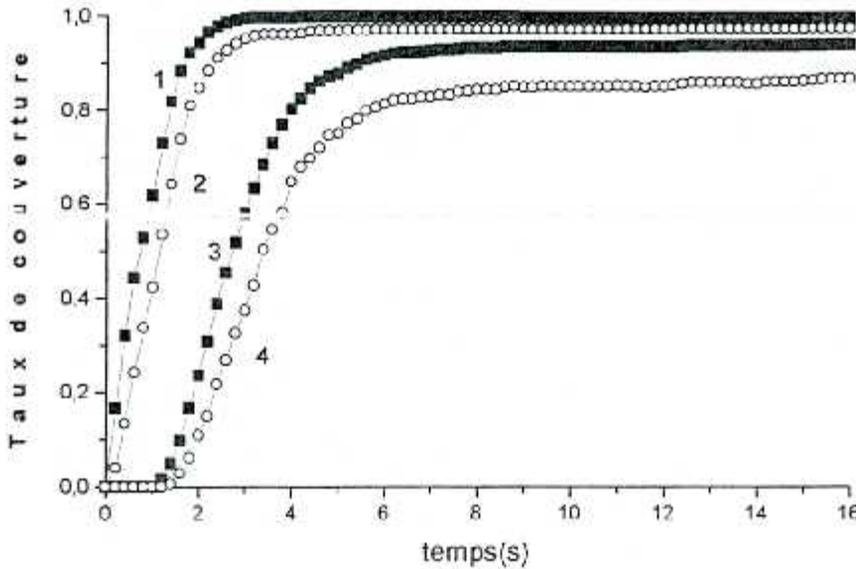


Fig. III-3 : Taux de couverture des couches de Ga et d'As en fonction du temps à $T=570^{\circ}\text{C}$ et pour un rapport de flux $\text{As/Ga}=20$

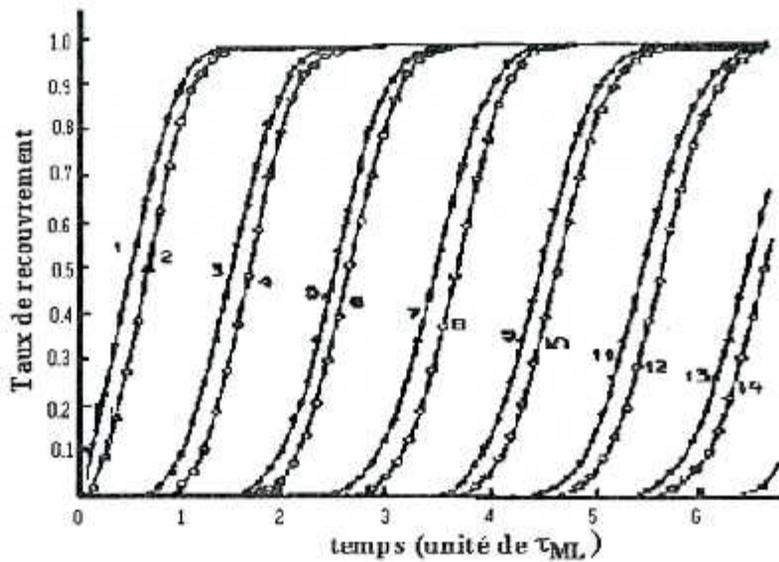


Fig. III-4 les taux de recouvrements des couches de Ga et d'As en fonction du temps exprimé en unité de τ_{ML} . Les chiffres impairs correspondent aux couches de Ga et chiffres pairs aux couches d'As (d'après [58]). Modèle CDRI $R_i \neq 0$ ($i=1, 2, 3, 4$)

L'interprétation de ce résultat revient au fait que les deux premières couches atomiques (Fig. III-2a) présentent un taux de couverture qui passe par trois phases :

- *Une phase de croissance linéaire progressive (I)*: qui correspond au début de la croissance, avec une vitesse de recouvrement constante
- *Une phase curviligne (II)*: qui représente la phase de transition entre le régime de recouvrement progressif et uniforme et le régime stationnaire (phase finale III)

Par contre, l'évolution de la troisième couche atomique et la quatrième couche passent par cinq phases de croissance (Fig. III-2b):

- 1^{ère} Phase de croissance (o-a) : elle correspond au début de l'évolution de la première et deuxième couche atomique de GaAs et l'absence de configurations favorables à l'adsorption des molécules d'Arsenic (As_2) de la troisième couche. Soulignons essentiellement que dans notre calcul, l'adsorption de l'Arsenic ne se fait que si au moins trois atomes de Gallium lui sont accessibles.
- 2^{ème} Phase de croissance (a-b): elle correspond à l'apparition des premières configurations favorables aux atomes des troisième et quatrième couches. Les diffusions inter-couches entraînent une évolution lente de ces couvertures.
- 3^{ème} Phase (b-c) : elle correspond à une évolution uniforme des troisième et quatrième couches
- 4^{ème} Phase (c-d) : c'est la phase de transition de l'état d'évolution uniforme de la couverture vers un état stationnaire.
- 5^{ème} Phase 5 (d-e) : c'est l'état final de la croissance de la couche étudiée (phase stationnaire). Dans ce dernier cas, les deux types de diffusions intra et inter-couches sont très rares

Ainsi, ce mécanisme de croissance correspond à un mode de croissance 2D. De plus, la couverture des couches en Gallium est suivie de près par celle des couches d'Arsenic indiquant ainsi les conditions d'une croissance riche en Arsenic. Un résultat similaire (Fig. III-5) a été obtenu plus tard par N. Fazouan[59] pour le même système de croissance avec $R_1=R_2=0$.

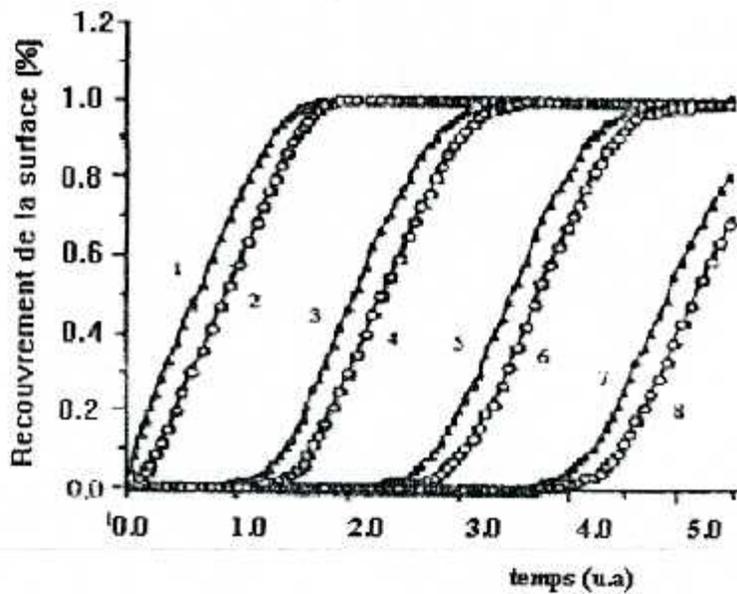


Fig. III-5 : Le taux de couverture des couches de Ga et d'As en fonction du temps (d'après [59]). Modèle CDRI ($R_1=R_2=0$)

D'autre part, en comparant les courbes représentant l'évolution temporelle du taux de couverture $\theta(t)$ dans la première version du simulateur [34] limité à deux couches atomiques GaAs/GaAs (100) (Fig. III-6) avec cette dernière version correspondant à la croissance de quatre couches atomiques GaAs/GaAs (100), nous remarquons que la troisième couche atomique peut activer l'évolution de la première couche à travers les diffusions inter-couches qui renforcent l'intensité du flux incident arrivant sur la première couche. De même, la quatrième couche peut servir de source d'atomes pour la deuxième couche à travers les configurations accrochées qui favorisent les diffusions inter-couches.

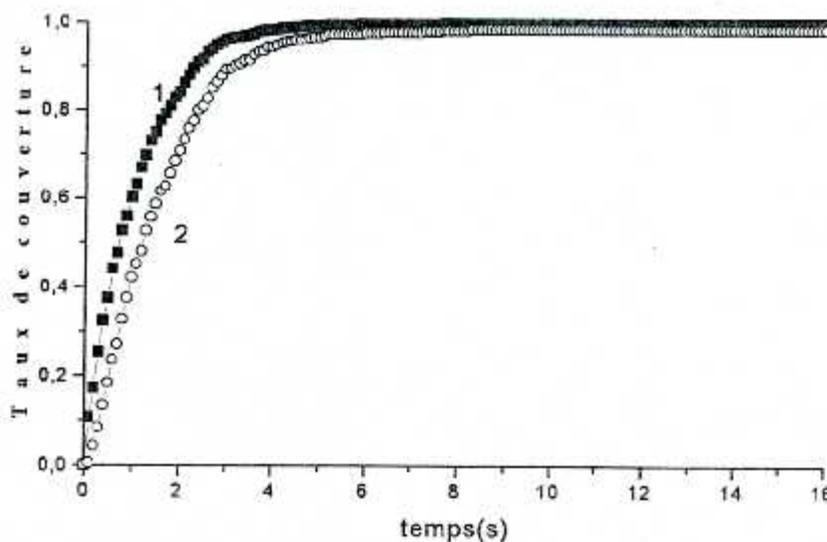


Fig. III-6 : le taux de couverture obtenu dans la première version de logiciel pour $T=570^\circ\text{C}$ et un rapport de flux As/Ga=20



III-2- Effet de la température sur l'évolution des couvertures :

L'influence de la température sur le taux de couverture est illustrée par la figure(III.7), pour un rapport de flux As/Ga égale à 9 ($\alpha_{Ga} = 1 \text{ s}^{-1}$) et pour trois températures de croissance différentes 530°C, 580°C et 620°C.

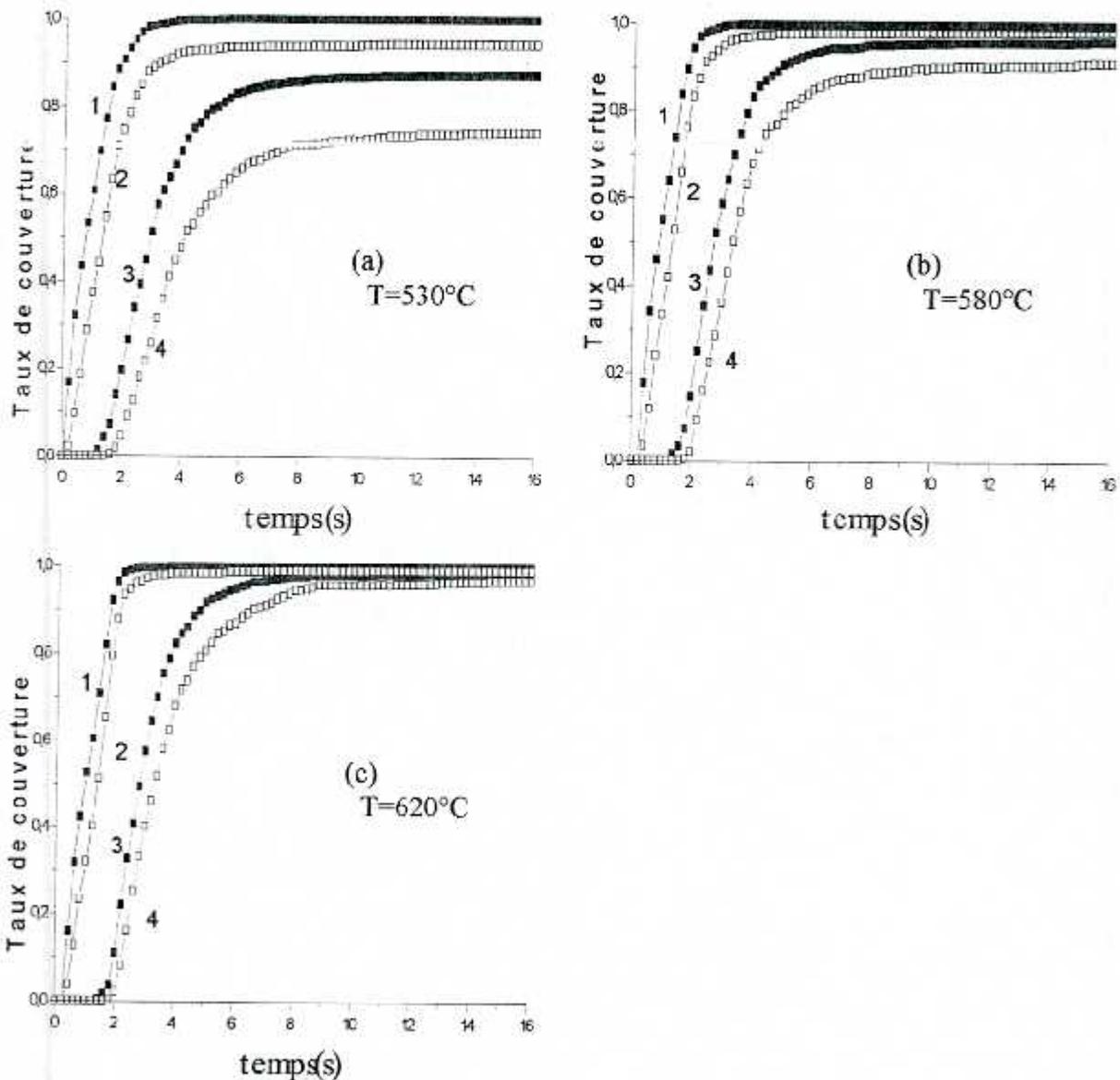


Fig. III-7 : Taux de couverture obtenu pour différentes valeurs de températures et un rapport de flux As/Ga=9

Nous remarquons que l'évolution du taux de couverture de la première couche moléculaire (Ga et As) en fonction du temps de croissance ne varie que légèrement. Nous constatons, également, que le mode d'évolution de la couverture n'a pas subi un changement avec l'influence de la température.

Quant à la deuxième couche moléculaire (Ga et As), nous notons que la vitesse de recouvrement (phase linéaire) est plus rapide à une température égale à 620°C qu'à celle de 530°C. De même, le taux de couverture en fin de manipulation (phase stationnaire) est plus élevé dans le cas de la température 620°C que celui correspondant à une température de 530°C. Cette élévation est due au taux élevé des diffusions (inter-couches) des couches supérieures vers les couches inférieures (Fig. III-8).

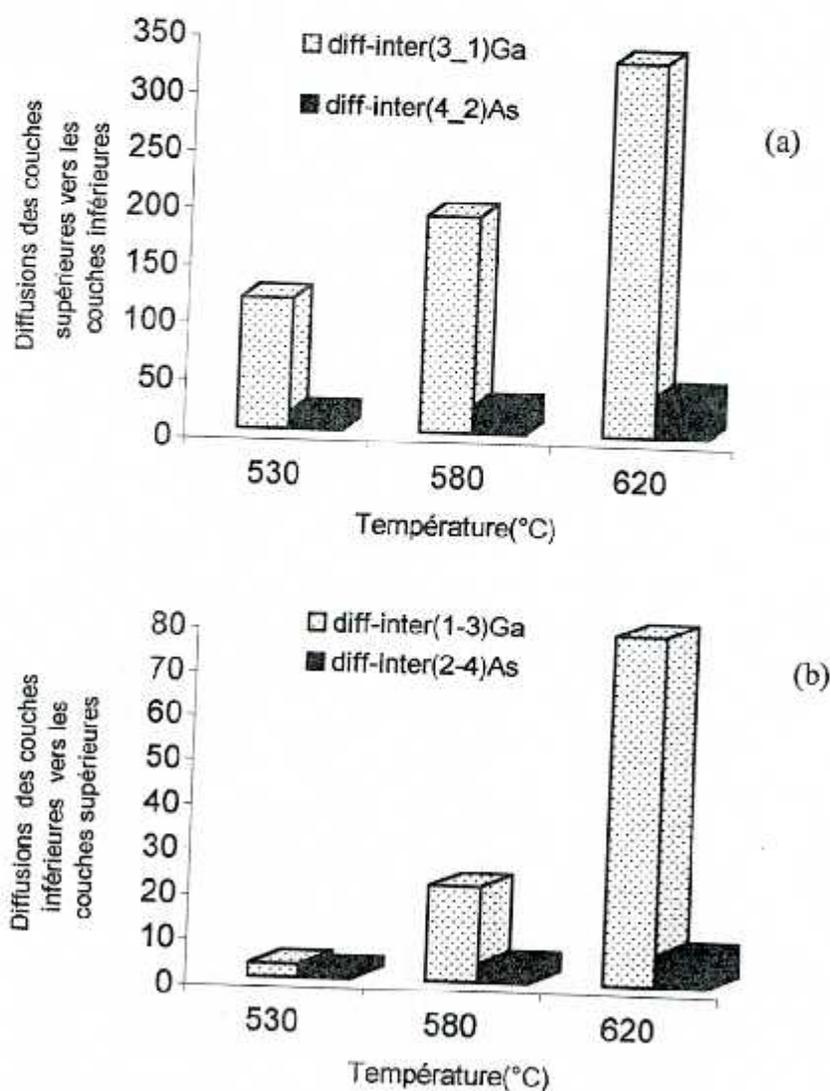


Fig. III-8 : Effet de la température sur les diffusions inter-couches pour le Gallium et l'Arsenic
 (a): Les diffusions des couches supérieures vers les couches inférieures
 (b): Les diffusions des couches inférieures vers les couches supérieures

III-3- Effet de l'intensité des flux incidents sur l'évolution des couvertures :

Ce paragraphe traite l'influence de l'intensité du flux de Gallium et d'Arсениc sur le taux de couverture des quatre monocouches atomiques de GaAs.

Sur la figure (III.9), nous avons représenté à une température de 530°C, l'évolution du taux de couverture en fonction du temps pour différentes intensités de flux. Le rapport de flux choisi dans ces expériences simulées est égal à 1.

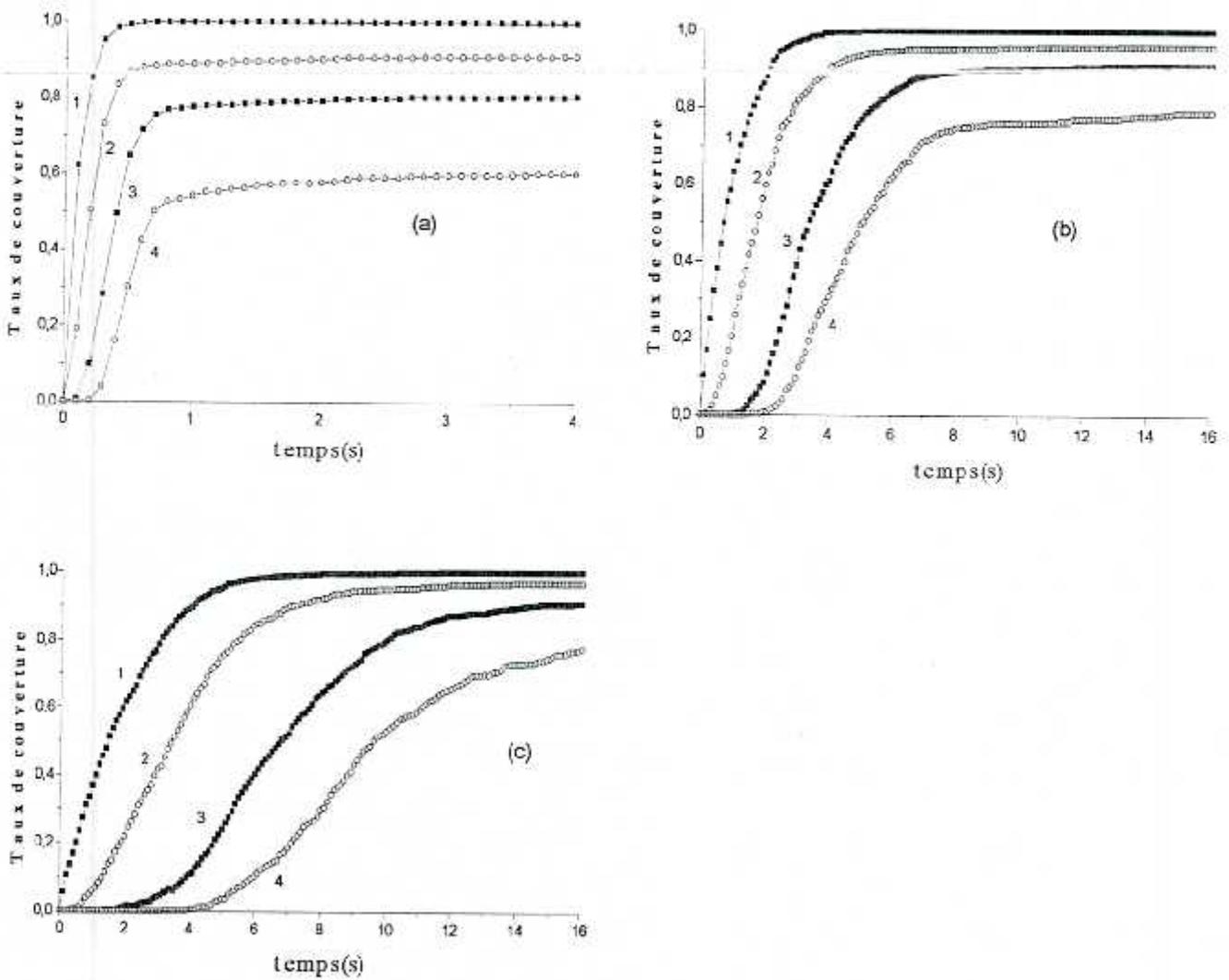


Fig. III-9 : Taux de couverture à une température $T=530^{\circ}\text{C}$ obtenu pour différentes intensités des flux :

(a): $J_{\text{Ga}} = 5 \cdot 10^{14}$ atome/cm².s correspondent à $\alpha_{\text{Ga}} = 10\text{s}^{-1}$

(b): $J_{\text{Ga}} = 5 \cdot 10^{13}$ atome/cm².s correspondent à $\alpha_{\text{Ga}} = 1\text{s}^{-1}$

(c): $J_{\text{Ga}} = 2,5 \cdot 10^{13}$ atome/cm².s correspondent à $\alpha_{\text{Ga}} = 0,5\text{s}^{-1}$

Pour des flux de Gallium et d'Arsenic élevés, soit $\alpha_{\text{Ga}} = 10 \text{ s}^{-1}$ et $\alpha_{\text{As}} = 10 \text{ s}^{-1}$ (Fig. III-9 a) nous constatons que les trois phases de croissance ont été reproduites après un temps de croissance égale à 1,5 secondes.

Pour des flux moins élevés (Fig. III-9 b), la phase stationnaire relative à la quatrième couche n'est atteinte qu'après un temps de 9 secondes, alors qu'avec un flux faible $\alpha_{\text{Ga}} = 0,5 \text{ s}^{-1}$ et $\alpha_{\text{As}} = 0,5 \text{ s}^{-1}$ (Fig. III-9c), l'évolution des couvertures des 4 couches est lente et le temps correspondant à la phase stationnaire dépasse 16s.

	Flux élevé	Flux moyen	Flux faible
Première couche (Ga)	$V_1 = 3071 \text{ atome/s}$	$V_1 = 391 \text{ atome/s}$	$V_1 = 210 \text{ atome/s}$
deuxième couche (As)	$V_{2/1} = 0.50$	$V_{2/1} = 0.52$	$V_{2/1} = 0.48$
troisième couche (Ga)	$V_{3/1} = 0.35$	$V_{3/1} = 0.33$	$V_{3/1} = 0.31$
quatrième couche (As)	$V_{4/1} = 0.26$	$V_{4/1} = 0.26$	$V_{4/1} = 0.27$

Tab.III-3 : Vitesses de croissance durant l'évolution uniforme et progressive de la couverture des couches pour différentes valeurs du flux et pour une température de croissance $T = 530^\circ\text{C}$

Flux élevé correspond ($\alpha_{\text{Ga}} = \alpha_{\text{As}} = 10 \text{ s}^{-1}$)

Flux moyen correspond ($\alpha_{\text{Ga}} = \alpha_{\text{As}} = 1 \text{ s}^{-1}$)

Flux faible correspond ($\alpha_{\text{Ga}} = \alpha_{\text{As}} = 0.5 \text{ s}^{-1}$)

Sur le tableau (III.3), on voit bien que les vitesses de l'évolution de la phase linéaire progressive diminuent considérablement quand l'intensité du flux incident devient faible. Par contre les vitesses relatives $V_{i/1} = \frac{V_i}{V_1}$ de chacune des couches ($i=1,2,3,4$) calculées par rapport à la première couche sont presque indépendantes de l'intensité du flux incident. Nous en concluons que l'intensité du flux incident peut accélérer ou ralentir l'évolution globale de la croissance, mais n'affecte pas la vitesse de croissance d'une couche par rapport à une autre.

IV- ETUDE DE LA DIFFUSION-DES ADATOMES DE GALLIUM AU COURS DE LA CROISSANCE GaAs/ GaAs (100) :

IV-1- Calcul de la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium :

Un adatome peut effectuer plusieurs sauts, inter-couches et intra-couche de longueur de diffusions l_j avant son incorporation. La longueur de sa trajectoire sera définie à la fin de son parcours par la relation suivante :

$$L = \sum_1^n l_j \tag{III-6}$$

n est le nombre total de sauts de l'adatome depuis son adsorption jusqu'à son incorporation.
 l_j est la longueur du $j^{ème}$ saut de l'adatome.

Le schéma de la figure (III.10) montre un exemple de calcul de la longueur de diffusion d'un adatome de Gallium, passant du site d'adsorption (i) de la troisième couche atomique (symbole Δ de l'adatome) vers le site vacant (j) de la première couche atomique (symbole \circ de l'adatome).

- La longueur d'un saut intra-couche S1 ou S2 est égale à $\frac{a}{\sqrt{2}}$
- La longueur d'un saut inter-couche S3 est égale à $\frac{\sqrt{3}a}{2}$
- La longueur d'un saut inter-couche S4 est égale à $\frac{a}{2}$

a: représente le paramètre de maille du GaAs qui vaut $5,65\text{Å}$ [60]

La longueur de diffusion de cet adatome est donc donnée par : $L = 2\frac{a}{\sqrt{2}} + \frac{a\sqrt{3}}{2} + \frac{a}{2}$

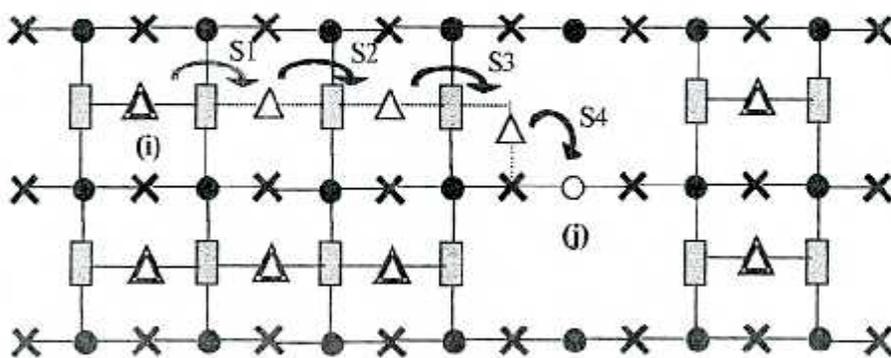


Fig. III-10 : Schéma montrant un exemple de trajet d'un adatome de Gallium passant du site (i) de la troisième couche vers le site (j) de la première couche

Comme les trajets des adatoms qui subissent des diffusions lors de la croissance sont différents, alors le formalisme statistique pour le calcul de la longueur moyenne de diffusion est:

$$l_{\text{moy}} = \frac{\sum_{i=1}^N L_i}{N} \quad \text{III-7}$$

avec

N est le nombre d'adatoms de Gallium ayant effectué des diffusions

i est le numéro de l'adatome suivie dans ses diffusions

L_i la longueur totale de diffusion effectuée par l'adatome i

La longueur moyenne de diffusion peut être exprimée soit en centimètre (système international C.G.S), soit en 'l.c' (système utilisé) qui vaut $\frac{a}{\sqrt{2}}$ dans le cas de la croissance GaAs/GaAs (100).

IV-2- L'évolution de la longueur moyenne de diffusion du Gallium au cours de la croissance :

L'évolution temporelle de la longueur moyenne de diffusion (L_{moy}) des adatoms de Gallium au cours de la croissance multicouches GaAs/GaAs (100) à été déjà décrite par certains auteurs tels que A. Madhukar et al [36] ainsi que N.V. Peskov [53]. Ces derniers ont donné une représentation oscillante de cette grandeur (L_{moy}) en fonction du temps (Fig. III-11).

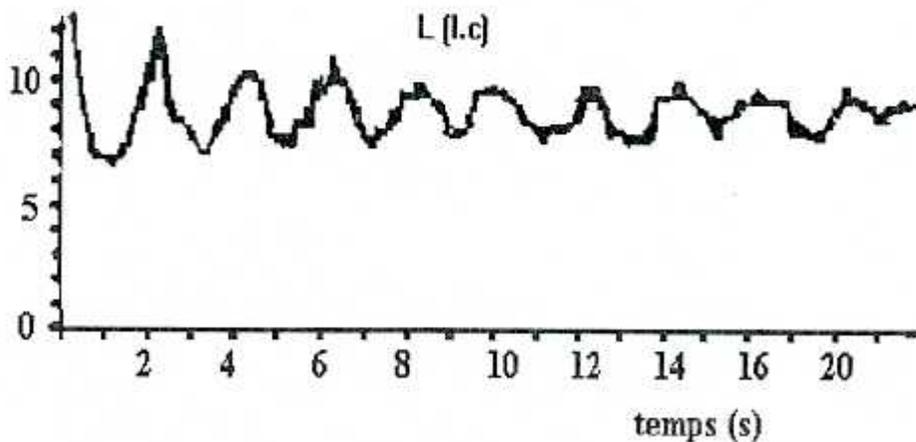


Fig. III-11 : La longueur de diffusion des adatoms de Gallium en fonction de temps de croissance (d'après [53]).

Dans notre simulation de la croissance des quatre couches atomiques de GaAs/GaAs (100), la variation de L_{moy} en fonction du temps de croissance est représenté sur la figure (III.12)

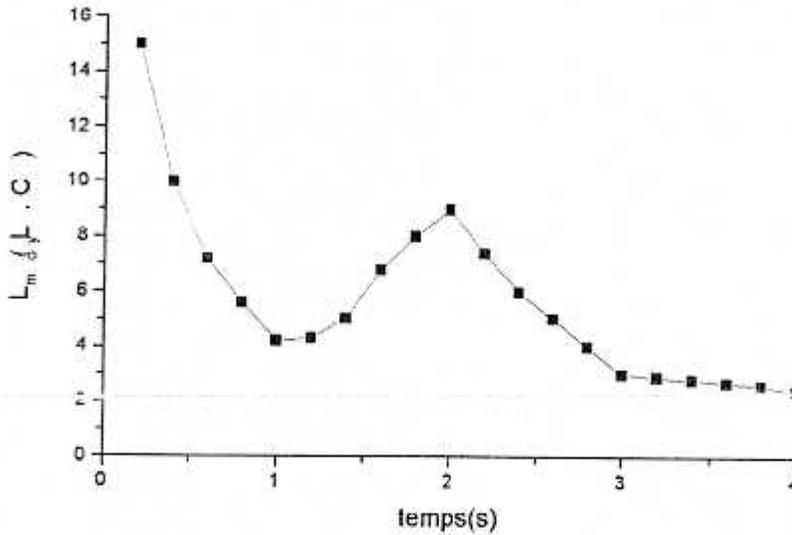


Fig. III-12 : Variation de la longueur moyenne de diffusion L_{moy} des adatoms de Ga en fonction du temps pour $T=600^{\circ}\text{C}$ et un rapport de flux $\text{As/Ga}=2$ ($\alpha_{\text{Ga}}=1 \text{ s}^{-1}$, $\alpha_{\text{As}}=2 \text{ s}^{-1}$)

Nous remarquons qu'au début de la croissance et au voisinage de $t=0,2 \text{ s}$, la longueur moyenne L_{moy} de diffusion des adatoms de Gallium est maximale de l'ordre de 15 l.c ($6 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$), et puis elle commence à diminuer progressivement avec le temps jusqu'à atteindre un minimum qui est de l'ordre de 4 l.c ($1,6 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$) à $t=1 \text{ s}$.

Nous interprétons ce résultat par le fait qu'au début de la croissance, les premiers adatoms de Gallium adsorbés de la première couche peuvent diffuser sur toute la surface du substrat d'où la valeur élevée de L_{moy} . La forte diminution de la longueur moyenne de diffusion au voisinage de $t=1 \text{ s}$ est due à l'adsorption des molécules d'Arsenic (As_2) sur les adatoms de Gallium de la première couche. Rappelons que chaque arrivée de As_2 entraîne l'incorporation d'au moins de trois adatoms adjacents de Gallium et par suite une diminution du nombre de diffusion intra-couche des adatoms de Gallium au niveau de la première couche (Fig. III-13).

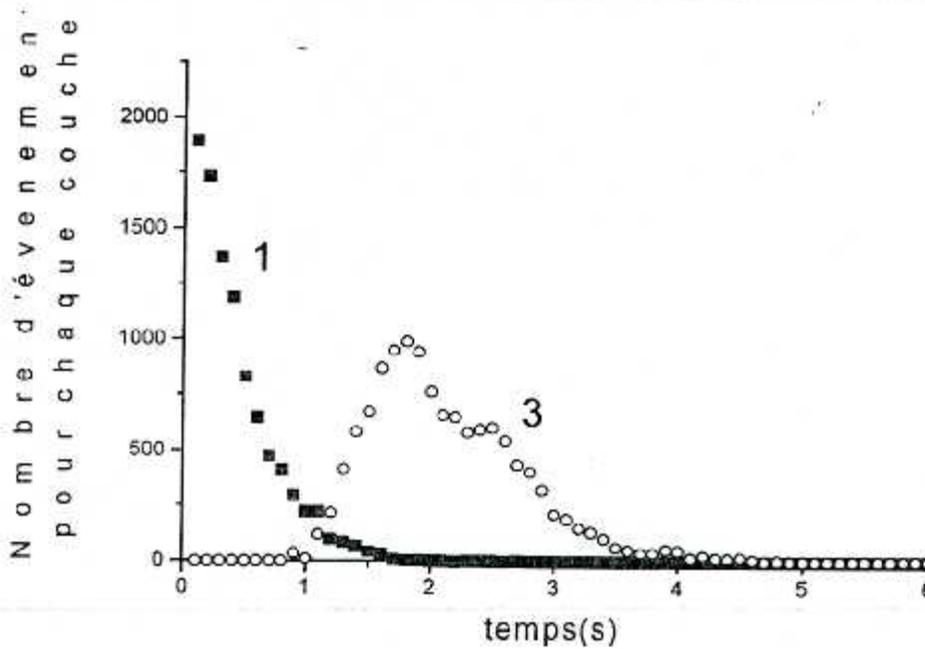


Fig. III-13 : Variation du nombre d'événement de diffusion pour chaque couche de Gallium en fonction de temps pour $T=600^{\circ}\text{C}$ et un rapport de flux $\text{As/Ga}=2$

1 : est le numéro de la première couche atomique de GaAs (100.)

3 : est le numéro de la troisième couche atomique de GaAs (100.)

Ensuite la courbe remonte jusqu'à un deuxième maximum (L_{moy} de l'ordre de 9 l.c) qui est atteint à $t=2$ s. A partir de cet instant, une deuxième rediminition de la longueur moyenne L_{moy} de diffusion de Gallium. De même, au cours de la formation de la troisième couche atomique de GaAs (100) durant l'intervalle de temps $1 \text{ s} \leq t \leq 2 \text{ s}$, le nombre de diffusions atomiques de Gallium de la troisième couche dominant les événements en surface (FigIII-13). L'adsorption des atomes de la quatrième couche atomique de GaAs (100) et l'évolution de cette dernière couverture ralentiront les diffusions intra-couches des adatoms de Gallium, d'où la faible valeur de la longueur moyenne de diffusion à la fin de la croissance.

IV-3- L'effet de la température sur la longueur moyenne de diffusion :

La figure (III.14) représente la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium en fonction du temps de croissance pour un rapport de flux As/Ga égal à 20 ($\alpha_{\text{Ga}}=1\text{s}^{-1}$ et $\alpha_{\text{As}}=20\text{s}^{-1}$) et deux températures de croissance qui sont 580°C et 620°C

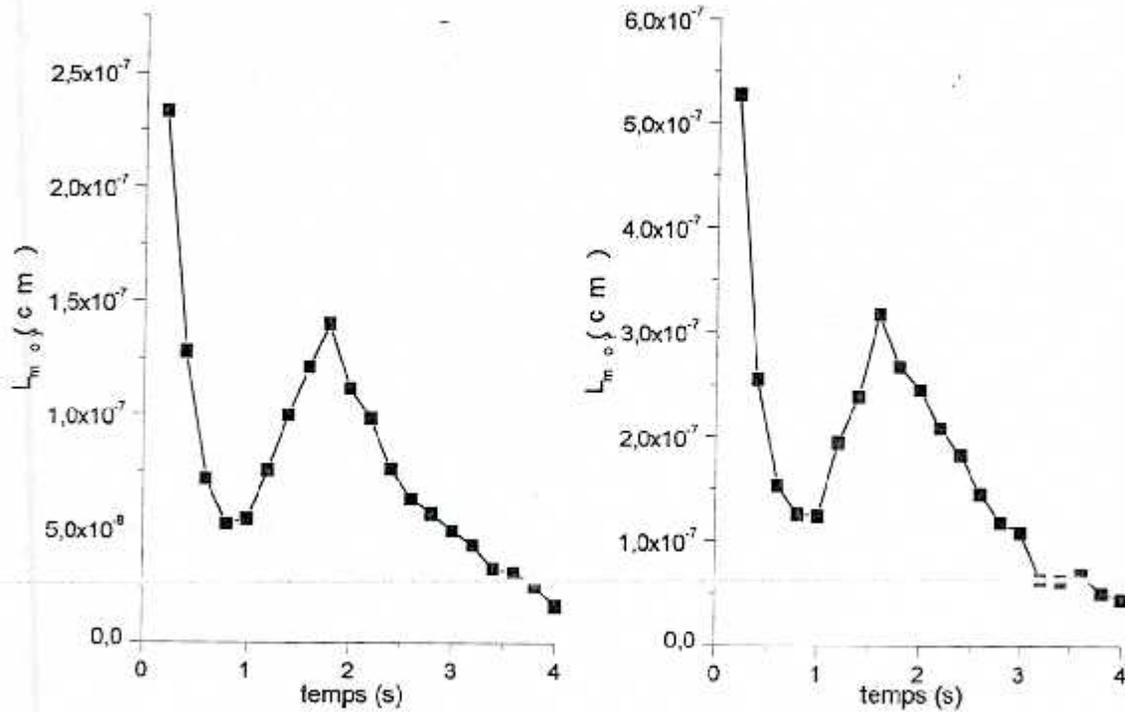


Fig. III-14 : La longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium en fonction de temps pour un rapport de flux As/Ga=20 et deux températures 580°C et 620°C.

On voit clairement que l'allure générale des courbes de cette figure, ainsi que la période des oscillations et les positions des maxima et minima de la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium ne sont pas affectés par la variation de température. Seule les valeurs des pics se trouvent plus élevées à la température 620 °C qu'à 580°C. Ce résultat est en accord avec les travaux de Nagata et Tanaka [61].

D'autre part, pour généraliser le résultat sur une gamme de température de [530°C – 620°C] et un rapport de flux F As/Ga fixé à 9, nous avons calculé la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium pour un temps de croissance de 3 secondes qui correspond au deuxième minimum et nous l'avons représenté sur la figure (III.15).

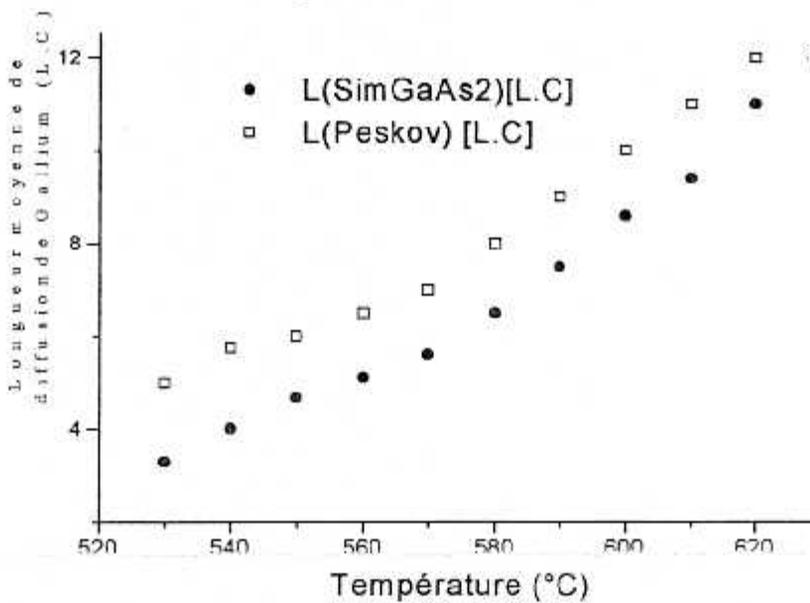


Fig. III-15: la variation de la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium obtenu par notre simulateur (LsimGaAs2) comparé au résultat de simulation de N. V. Peskov (Lpeskov)

Nous remarquons sur la figure (III.15), une évolution progressive de L_{moy} en fonction de la température. Ce résultat est similaire à celui trouvé par Peskov [53]. Sur le plan qualitatif, la longueur de diffusion des adatoms de Gallium dans la gamme de température [530°C – 620°C] varie de 3.3 l.c ($1,3 \cdot 10^{-7}$ cm) à 11 l.c ($4,4 \cdot 10^{-7}$ cm).

V- ETUDE DU COEFFICIENT DE DIFFUSION DES ADATOMES DE GALLIUM :

V-1- Calcul du coefficient de diffusion des adatoms de Gallium :

Un atome de Gallium provenant de la phase gazeuse adsorbé en un site quelconque peut effectuer plusieurs diffusions intra-couches et inter-couche. Dans notre simulateur, les atomes de Gallium subissent un suivi dès leurs adsorptions jusqu'à leur incorporation. Ainsi, pour chaque adatome de Gallium (i) en surface, on déterminera le temps τ_i et la longueur de diffusion l_i . Le coefficient de diffusion qui représente l'aire balayée par l'adatome par unité de temps est donné par la relation [53] [62] :

$$D = \frac{\langle l^2 \rangle}{\tau} \quad \text{III-8}$$

où $\langle l^2 \rangle$ est le parcours quadratique moyen calculé comme suit :

$$\langle l^2 \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N l_i^2}{N} \quad \text{III-9}$$

N est le nombre d'adatoms de Gallium ayant réalisés des diffusions intra-couche ou inter-couches avant incorporation

l_i est la longueur de diffusion de l'adatome i calculée par la formule III-6

τ est le temps moyen de diffusion définie comme suit :

$$\tau = \frac{\sum_{i=1}^N \tau_i}{N} \quad \text{III-10}$$

où τ_i est le temps diffusion de l'adatome i réalisant le parcours l_i .

V-2- L'évolution du coefficient de diffusion du Gallium au cours de la croissance :

La figure (III.16) montre l'évolution temporelle du coefficient de diffusion des adatoms de Gallium pour une température de 600°C et un rapport de flux As/Ga égal à 2.

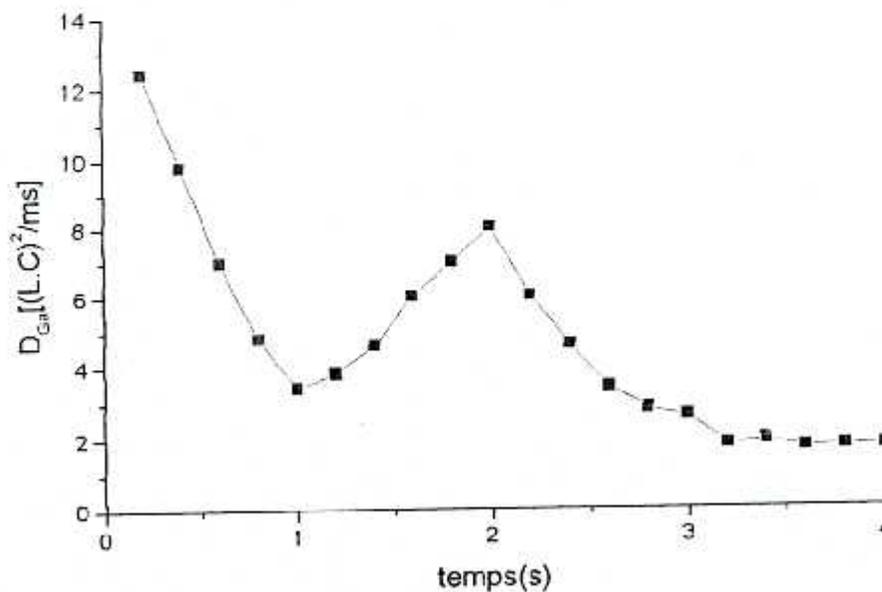


Fig. III-16 : Variation du coefficient de diffusion D_{Ga} des adatoms de Ga en fonction du temps pour $T=600^\circ C$ et un rapport de flux As/Ga=2 ($\alpha_{Ga}=1 s^{-1}$, $\alpha_{As}=2 s^{-1}$)

On remarque que le coefficient de diffusion des adatoms de Gallium est maximal au début de la croissance soit pour $0 < t < 0.2s$. Ceci correspond sur la figure (III.17) aux premiers instants de l'évolution de la première couche atomique de Gallium sur une surface lisse du substrat. Ainsi les adatoms diffusent librement sur toute la surface avant la formation des configurations adéquates (trois Gallium adjacents au minimum) nécessaire pour l'adsorption de l'Arsenic formant la couche suivante.

Au fur et à mesure, que les adatoms de Gallium sont adsorbés sur le substrat, les molécules d'Arsenic s'y fixent et couvrent le Gallium de la première couche en entraînant la diminution de la diffusion et le minimum est atteint juste avant le commencement de la troisième couche atomique soit quand le substrat est couvert de 62% de Gallium de la première couche et 42% d'Arsenic de la deuxième couche (Fig. III- 17).

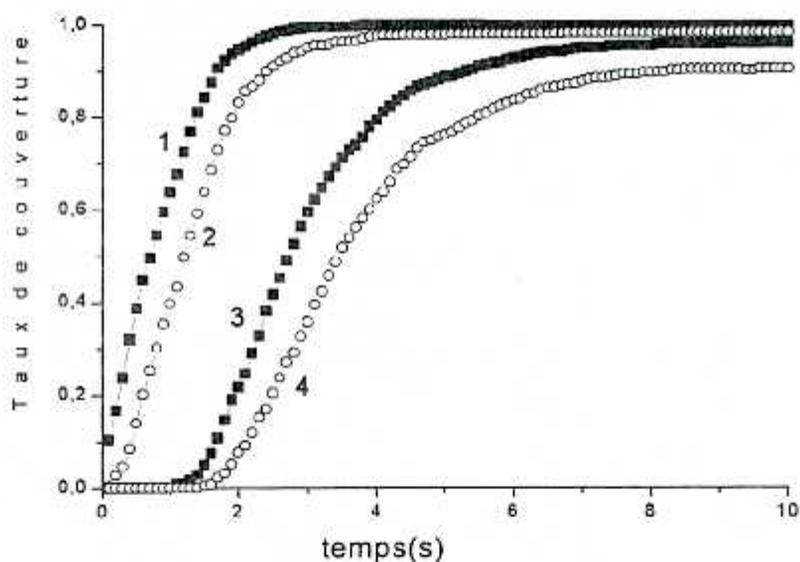


Fig. III-17 : Taux de couverture pour une température de 600°C et rapport de flux As/Ga égal 2

La réaugmentation du coefficient de diffusion des adatoms dans l'intervalle de temps $1s < t < 2s$ est justifiée par le début de l'évolution de la couche atomique de Gallium numéro 3. Le deuxième maximum est atteint au voisinage de $t=2s$. Une rediminution de D_{Ga} à partir de $t > 2s$ qui est due à l'adsorption des molécules de la quatrième couche atomique en nombre suffisant entraînant l'incorporation du Gallium de la couche inférieure.

Ce résultat est en accord avec les travaux de N.V. Peskov qui a étudié le même système de croissance GaAs/GaAs (100). Il a montré que le coefficient de diffusion fluctue dans le temps comme le montre la figure (III.18).

$$D [(\text{l.c})^2 / \text{ms}]$$

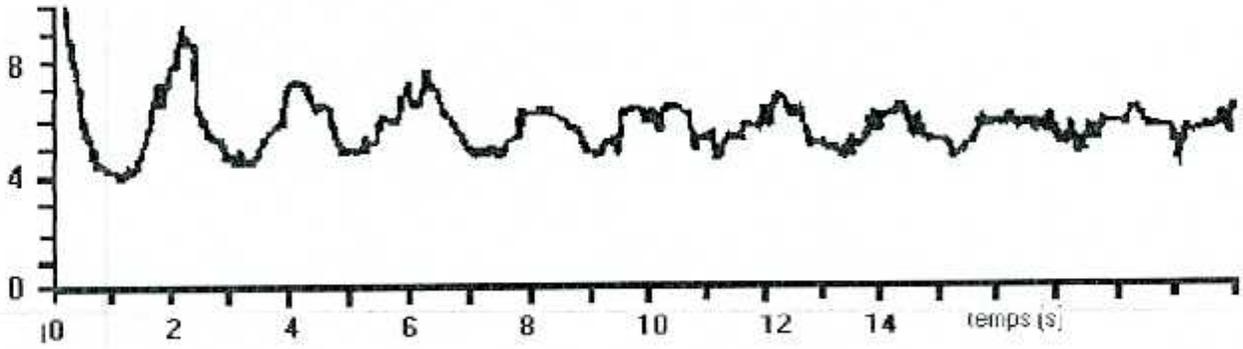


Fig. III-18 : La variation du coefficient de diffusion des adatoms de Gallium en fonction de temps de croissance (d'après [53]).

V-3- L'effet de la température sur le coefficient de diffusion des adatoms du Gallium :

La figure (III.19) montre l'évolution du coefficient de diffusion en fonction de la température prise dans la gamme [530°C - 620°C], pour un temps de croissance égal 3 seconds et un rapport de flux As/Ga étant fixé à 9.

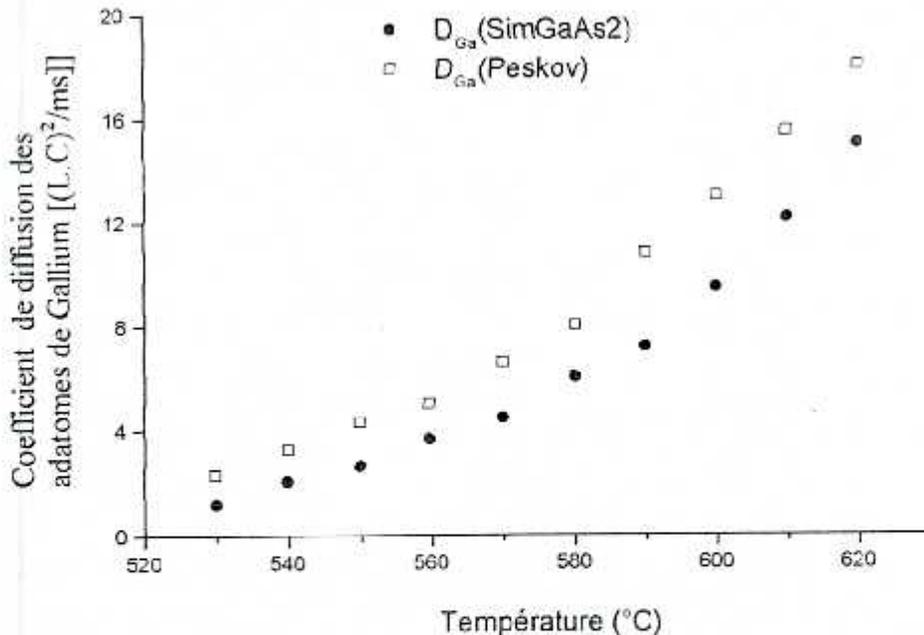


Fig. III-19 : la variation du coefficient de diffusion des adatoms de Gallium dans la gamme de température [530°C - 620°C]

D_{Ga} (SimGaAs2) : résultat obtenu par notre simulateur (SimGaAs2)

D_{Ga} (Peskov) : résultat de simulation de N. V. Peskov [53]

Sur cette figure, nous constatons clairement la tendance similaire des deux courbes qui suivent la loi d'Arrhenius donnée par la relation :

$$D = D_0 e^{\frac{-E_a}{KT_s}} \quad \text{III-11}$$

D_0 est une constante, T_s est la température du substrat (en Kelvin) et E_a est une énergie d'activation relative à l'événement de diffusion.

Pour déterminer la valeur de D_0 à travers notre simulateur, nous avons représenté sur la figure (III-20) la variation du logarithme népérien du coefficient de diffusion des adatoms de Gallium en fonction de l'inverse de la température du substrat.

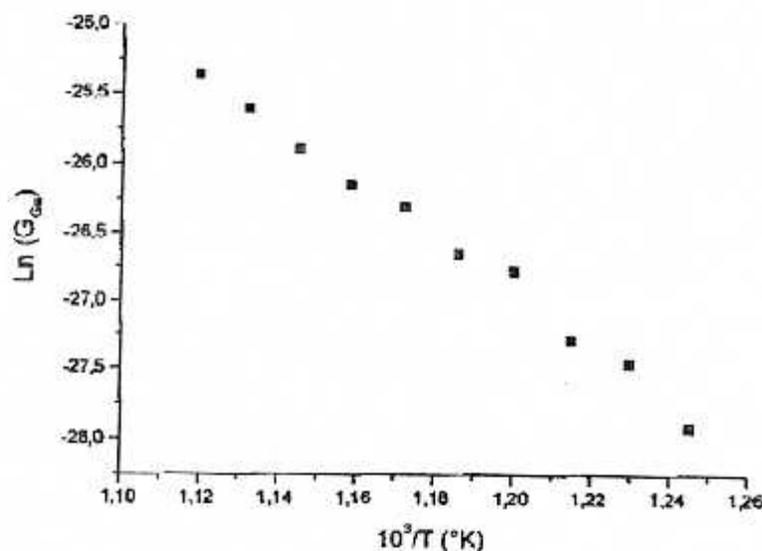


Fig. III-20: Diagramme d'Arrhenius de $\ln(D_{Ga})$ en fonction de $1/T$

La courbe est une droite d'ordonnée à l'origine ($\ln D_0$) et de pente ($-E_a/K$) comme le montre le développement de l'équation (III-11) :

$$\ln D = \ln D_0 - \frac{E_a}{K} \left(\frac{1}{T} \right) \quad \text{III-12}$$

Nous constatons que la valeur $D_0 = 1,4 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$ obtenu du graphe de la figure (III-20) est de même ordre de grandeur que celle obtenu par N. V. Peskov qui égale à $2,4 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$.

VI- ANALYSE DE LA SURFACE :

Les oscillations de l'intensité RHEED en cours de croissance correspondent à des variations de la réflectivité de surface par modification de la rugosité de la surface [63]. D.Vvedensky et al [64-65] ont décrit l'évolution de l'intensité RHEED à partir de la densité de marches en surface, alors que R.Kaspi et S.A Barnett [51] trouvent que la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium est un paramètre clé pour déterminer la rugosité de la surface où à travers on peut estimer la qualité de la surface, ils montrent que la diffusion des adatoms de Gallium joue un rôle important pour déterminer la morphologie de la surface.

VI-1- Analyse de la surface en terme de rugosité et de densité de marches:

VI-1-1- Calcul de la Rugosité de la surface :

Dans l'approche à l'échelle atomique, la rugosité est calculée par la formule suivante [66] :

$$R_s = \left(\frac{1}{N} \sum_i (h_i(t) - \langle h(t) \rangle)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{III-13}$$

où

N est le nombre total de sites à la surface.

t représente le temps courant de la croissance.

$h_i(t)$ est la hauteur du film mince obtenu au site i et à l'instant ' t ' de la croissance de GaAs/GaAs(100)

$\langle h(t) \rangle$ est la hauteur moyenne de la croissance à l'instant ' t ' et donnée par :

$$\langle h(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_i h_i(t) \quad \text{III-14}$$

Notre simulateur de la croissance GaAs/GaAs (100) est limité à quatre couches, et le nombre N de sites en surface est égal à 900.

VI-1-2- Calcul de la Densité de marches en surface :

La densité de marches représente une autre source d'information sur la morphologie de la surface. D.Vvedensky et al. [64] ont montré que la densité de marches fournit une représentation qualitative excellente de l'évolution de l'intensité RHEED. Dans notre étude, cette information est comparée avec la rugosité de la surface. Nous avons calculé la densité de marches le long de la direction $\langle 011 \rangle$ selon la formule suivante [60] :

$$DM(t) = \frac{1}{N} \sum_{ik} (1 - \delta(h_i(t), h_k(t))) \quad \text{III-15}$$

où $\delta(i, j)$ est la fonction de Kronecker, h_i est la hauteur du site i , k est le site voisin \dots site i suivant la direction $\langle 110 \rangle$ et N est le nombre total de sites à la surface.

VI-1-3- Correspondance entre Rugosité et Densité de marches en surface :

Nous avons représenté sur la figure (III.21) l'évolution en fonction du temps de la rugosité et de densité de marches pour une température de 580°C et un rapport de flux As/Ga égal 10.

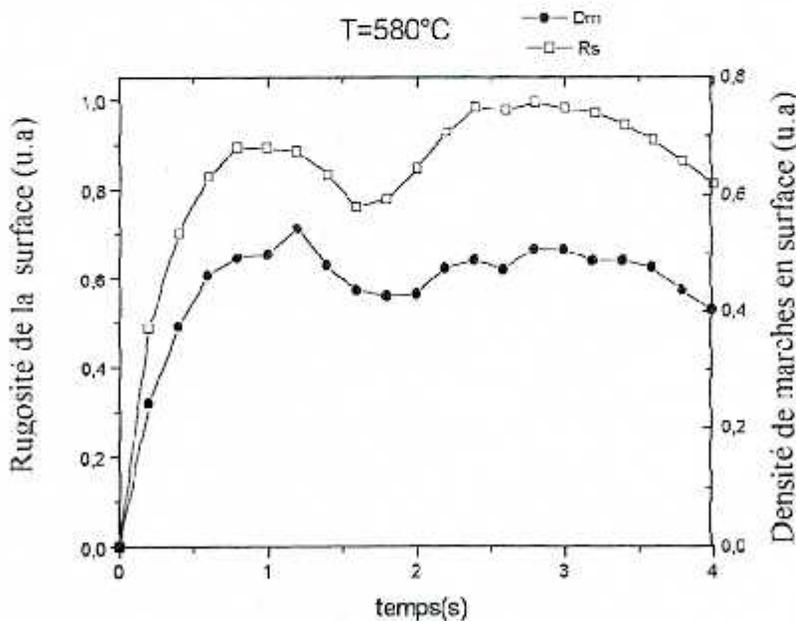


Fig. III-21 : Evolution de la Rugosité et de la Densité de marches en fonction du temps de croissance pour une température de $T=580^\circ\text{C}$ et un rapport de flux As/Ga=10

La figure (III.21) montre l'oscillation de la rugosité et la densité de marches au cours de la croissance. Nous constatons une ressemblance entre le mode de l'évolution de la rugosité et la densité de marches. La coïncidence des temps correspondant aux maximums et aux minimums de la rugosité et ceux de la densité de marches en surface montre qu'à l'échelle atomique, la surface est d'autant plus rugueuse que la densité de marches est maximale.

VI-1-4- Correspondance entre Rugosité et la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium :

L'évolution de la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium et la variation de la rugosité de la surface en fonction du temps sont représentées sur la figure (III.22), pour une température de 620°C et un rapport de flux As/Ga égal à 10.

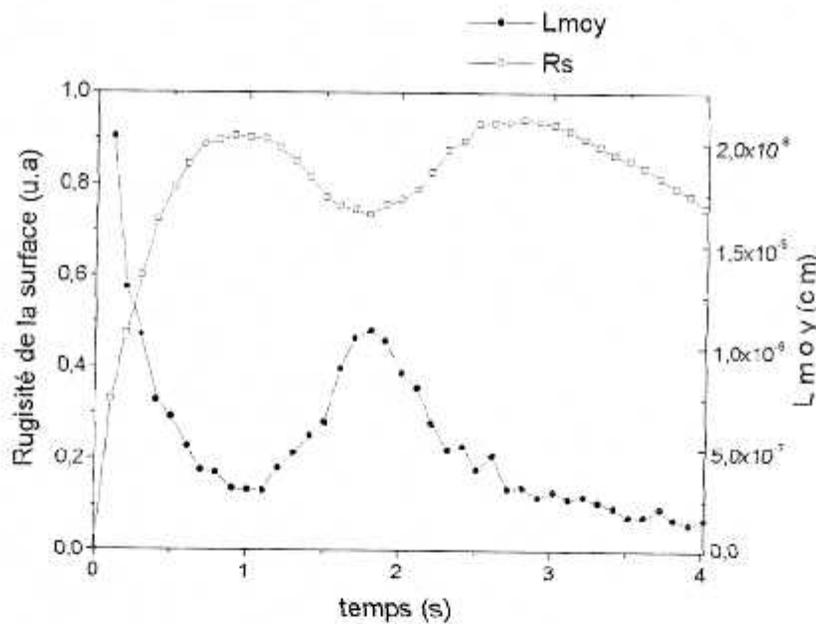


Fig. III-22 : Evolution de la Rugosité et de la longueur moyenne de diffusion en fonction du temps de croissance pour $T = 620^{\circ}\text{C}$ et un rapport de flux $\text{As/Ga} = 10$

Nous remarquons sur cette figure, qu'au début de la croissance, la rugosité de la surface est minimale et la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium est maximale. Au fur et à mesure que les atomes de Gallium sont adsorbés en surface, $0 < t < 1$ s, l'espace libre sur la surface du substrat, non recouvert par les atomes du Gallium de la première couche, devient de plus en plus faible et la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium atteint la valeur minimale à $t = 1$ s.

L'augmentation de la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium dans l'intervalle de temps $1s < t < 2s$ correspond à la diminution de la rugosité des surfaces par l'évolution de la couche d'Arsenic au dessus du Gallium. Cette dernière favorise l'adsorption du Gallium de la troisième couche atomique et par suite leurs diffusions intra-couche et inter-couches deviennent de plus en plus élevées que la surface d'Arsenic est plus large.

La rediminution de L_{moy} des adatoms de Gallium à partir de $t > 2s$ correspond à l'évolution de la quatrième couche atomique (Arsenic) entraînant l'incorporation du Gallium de la troisième couche (Gallium) d'où la tendance vers les très faibles longueurs de diffusion dans la gamme de température $[530^{\circ}C - 620^{\circ}C]$.

VI-2- Analyse de la surface par la technique RHEED :

VI-2-1- Etude cinétique de la croissance de quatre couches atomiques du système GaAs/GaAs (100) par RHEED :

Pour analyser la structure de la surface d'un semi-conducteur ou d'un matériau solide, en général, différentes techniques de diffraction d'électrons sont utilisées : LEED (Low Energie Diffraction), MEED (Middle Energie Electron Diffraction) et RHEED (Reflection High Energy Electron Diffraction). Cette dernière constitue la technique la plus utilisée pour le suivi de la croissance cristalline en temps réel [67].

L'étude de l'intensité de la tache spéculaire du diagramme RHEED montre des oscillations de forte amplitude qui s'atténuent progressivement pendant la croissance. L'amplitude de ces oscillations dépend des conditions de croissance qui sont : température du substrat, l'intensité du flux d'Arсениc et l'intensité du flux du Gallium. Lorsque la croissance est arrêtée, selon Neave et al. [63] le signal revient exponentiellement à son niveau de départ (Fig. III-23)

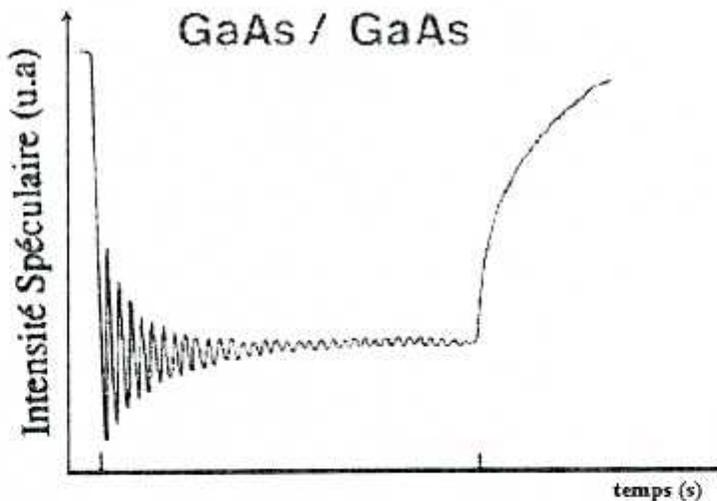


Fig. III-23 : Oscillations RHEED lors de la croissance de GaAs/ GaAs, avec récupération de l'intensité initiale à l'arrêt de la croissance

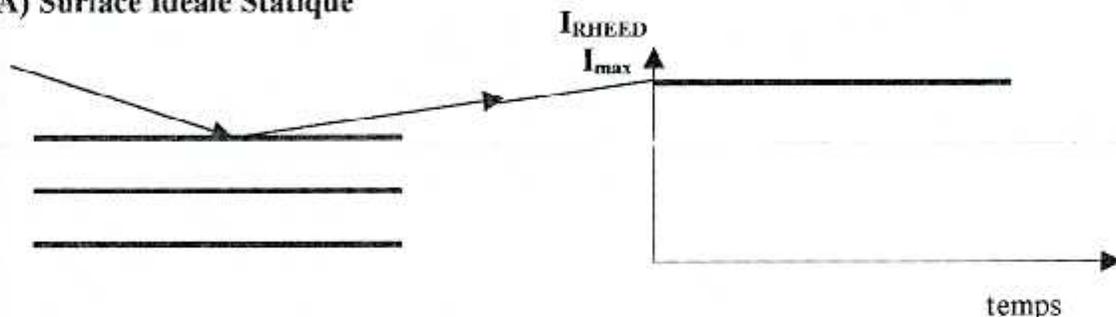
Joyce et Van Hove [68] ont interprété les oscillations RHEED comme caractéristique d'un mode de croissance bidimensionnel. Ils suggèrent que l'intensité de la tache spéculaire dépend de la réflectivité de la surface au cours de la formation d'une couche complète. La croissance d'une



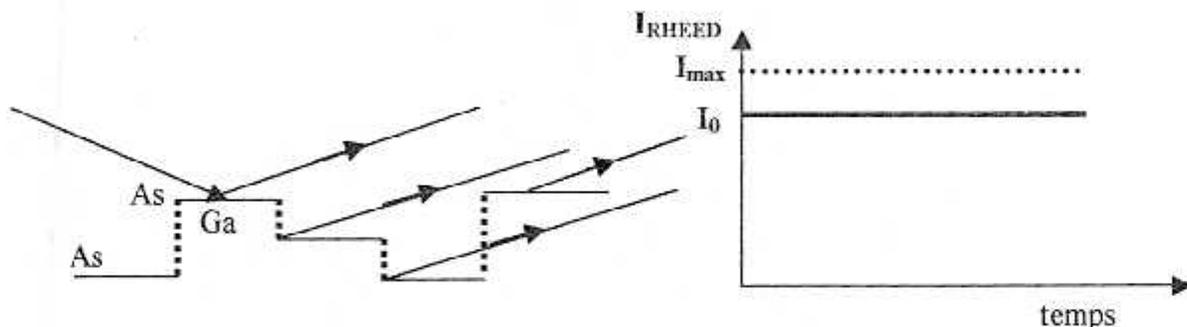
monocouche diminue la réflectivité par formation d'îlots bidimensionnel en surface et l'intensité de la tache spéculaire passe par un minimum lorsque environ une demi-couche est formée.

La monocouche achevée, la réflectivité devient à nouveau maximale. La durée qui sépare deux maxima successifs correspond à la croissance d'une monocouche. Progressivement, il arrive qu'une nouvelle monocouche commence à se former avant que la précédente soit complète. Ce processus entraîne l'atténuation des oscillations (Fig. III-24).

(A) Surface Idéale Statique



(B) Surface Réelle Statique (formation d'îlot)



(C) Durant la croissance (analyse In-Situ)

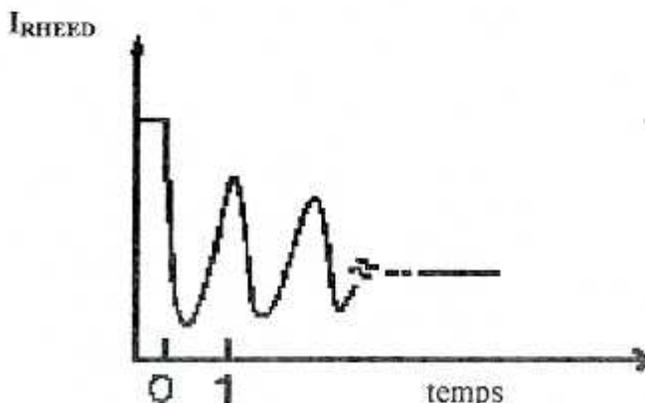


Fig. III-24: Schématisation de la relation entre les oscillations RHEED et la morphologie de la surface

VI-2-2- Calcul de l'intensité RHEED :

Dans le cadre de la théorie cinématique, l'amplitude diffractée par la surface d'un cristal est donnée par la relation [69] :

$$A(q) = \sum_i \exp(j\vec{q} \cdot \vec{r}_i) \quad \text{III-16}$$

où

$$\vec{q} = \vec{k}_0 - \vec{k}$$

\vec{k}_0 et \vec{k} sont les vecteurs d'onde respectivement incident et diffusé

L'intensité RHEED (I_{RHEED}) s'exprime par le module au carré de la différence entre le taux de couverture θ des couches paires et impaires à la surface.

$$I_{RHEED} = \left| \sum_n (\vartheta_n - \vartheta_{n+1}) \exp(jq_{\perp} d) \right|^2 \quad \text{III-17}$$

L'approche basée sur la simulation de la croissance à l'échelle atomique prend en considération la présence à la surface de deux types d'atomes. Les taux de recouvrement ϑ_n et ϑ_{n+1} de la relation (III.17) correspondent respectivement à des plans adjacents de Ga et d'As séparés d'une distance réticulaire $d_{\text{Ga-As}}$ et ayant une différence de phase de $n\pi/2$, ($qd_{\text{Ga-As}} = n\pi/2$). Ainsi l'intensité RHEED dans le cas de cette approche s'écrit :

$$I_{RHEED} = \left| \sum_n (\theta_n - \theta_{n+1}) (j)^n \right|^2 \quad \text{III-18}$$

Notre simulateur étant limité à quatre couches, n varie donc de 0 à 4. L'équation (III.18) se réduit alors à l'expression suivante :

$$I_{RHEED} = 1 + 2(\theta_1^2 + \theta_2^2 + \theta_3^2 + \theta_4^2 - \theta_1 - \theta_2 + \theta_3 + \theta_4 - 2\theta_1\theta_3 - 2\theta_2\theta_4) \quad \text{III-19}$$

VI-2-3- Variation des oscillations RHEED avec les conditions de croissance :

Comme nous l'avons mentionné précédemment, les oscillations RHEED dépendent des conditions de croissance. Dans ce paragraphe, nous allons essentiellement examiner l'effet de différents paramètres sur les oscillations RHEED :

- Nombre de couches atomiques déposées sur la surface du substrat GaAs (100).
- Température de croissance.
- Pression du flux incident.

VI-2-3-1- Effet de nombre de couches atomiques déposées sur le RHEED :

Le nombre d'oscillations de RHEED représente le nombre de couches déposées dans une croissance bidimensionnelle. Dans la première version du logiciel [34], relative à la simulation de la croissance cristalline de deux couches atomiques GaAs/GaAs (100), une seule oscillation est obtenue comme le montre la figure (III.25)

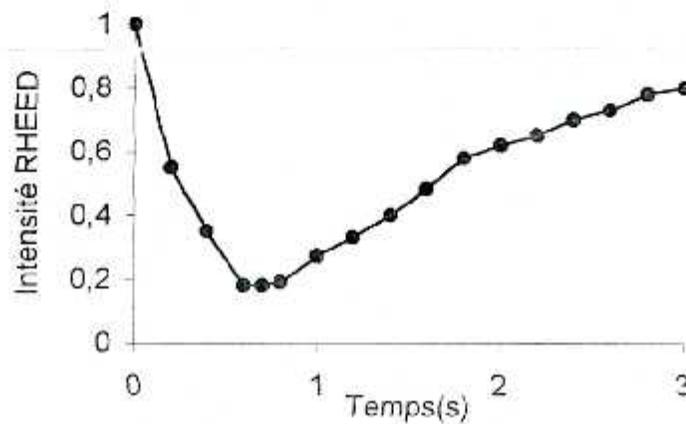


Fig. III-25 : Variation de l'intensité RHEED en fonction du temps Pour $T=600K$ et un rapport de flux As/Ga=1 d'après la première version du logiciel [34]

La figure (III.26) montre deux oscillations de RHEED obtenues par notre simulateur qui décrit la croissance cristalline de quatre couches monoatomiques GaAs/GaAs (100).

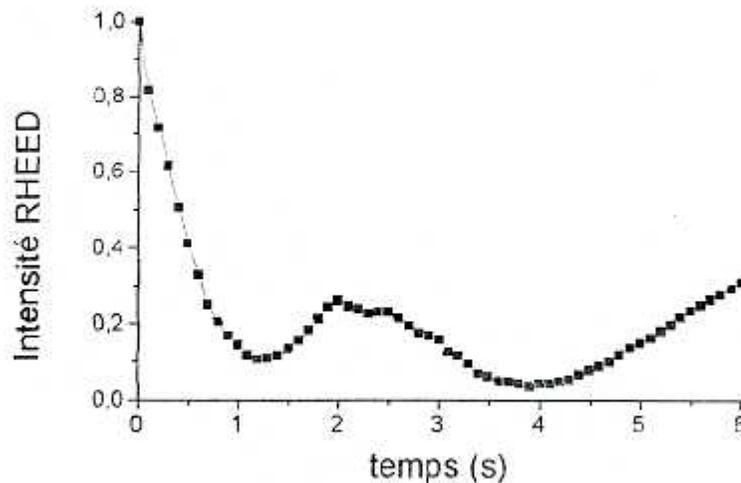


Fig. III-26 : Variation de l'intensité RHEED en fonction du temps Pour $T=580^{\circ}C$ et un rapport de flux As/Ga=1

VI-2-3-2- Effet de la température sur les oscillations RHEED :

L'influence de la température de croissance sur les oscillations RHEED est illustrée sur la figure (III.27) pour un rapport de flux As/Ga=20, et pour deux températures du substrat 580°C et 620°C. Le flux de Gallium a été maintenu constant (correspondant à $\alpha_{Ga} = 1 \text{ s}^{-1}$)

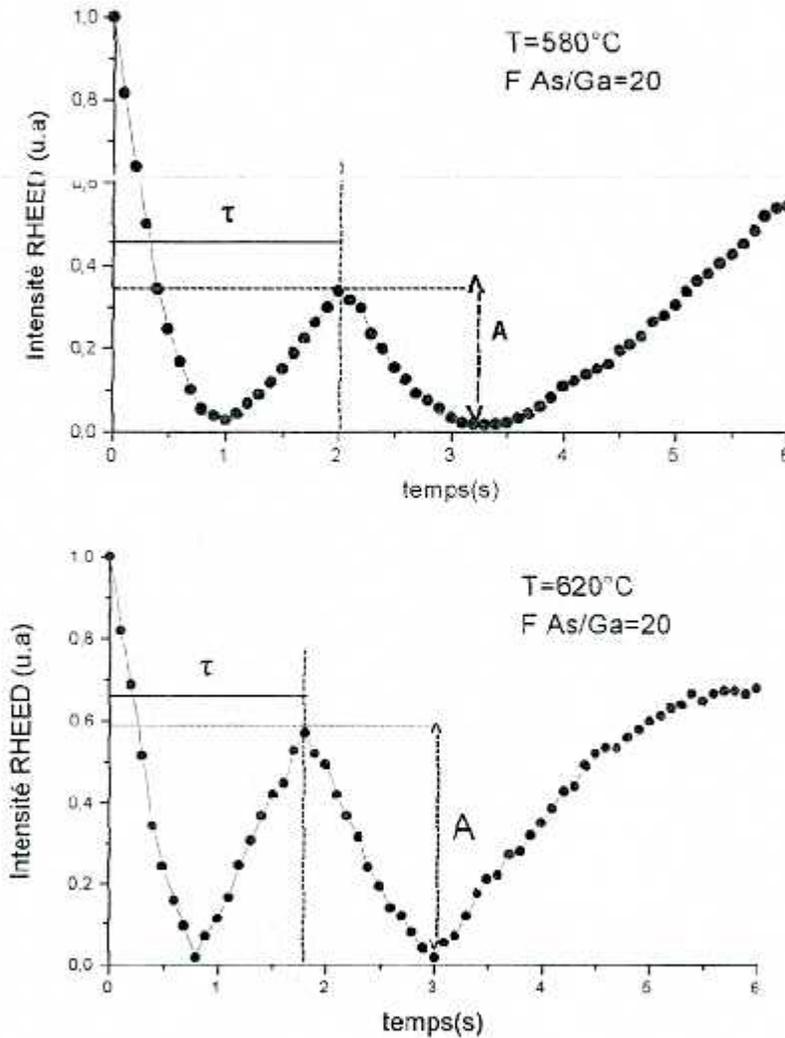


Fig. III-27: Courbes correspondant aux oscillations RHEED prises pour deux températures de croissance 580°C et 620°C et un rapport de flux As/Ga=20

Nous remarquons sur la figure (III.27) que l'amplitude A de l'intensité RHEED est plus élevée à 620°C qu'à 580°C , alors que la période τ d'oscillation a légèrement diminué par élévation de température

Ainsi à une température élevée (620°C), la diffusion des adatoms intra et inter-couches de Gallium (Fig. III-28) devenant suffisamment élevée entraîne le remplissage des lacunes de la première couche en croissance et formation des surfaces de qualité meilleure. Ceci explique alors l'augmentation de l'amplitude des oscillations RHEED avec une élévation de température dans la gamme [$530^{\circ}\text{C} - 620^{\circ}\text{C}$].

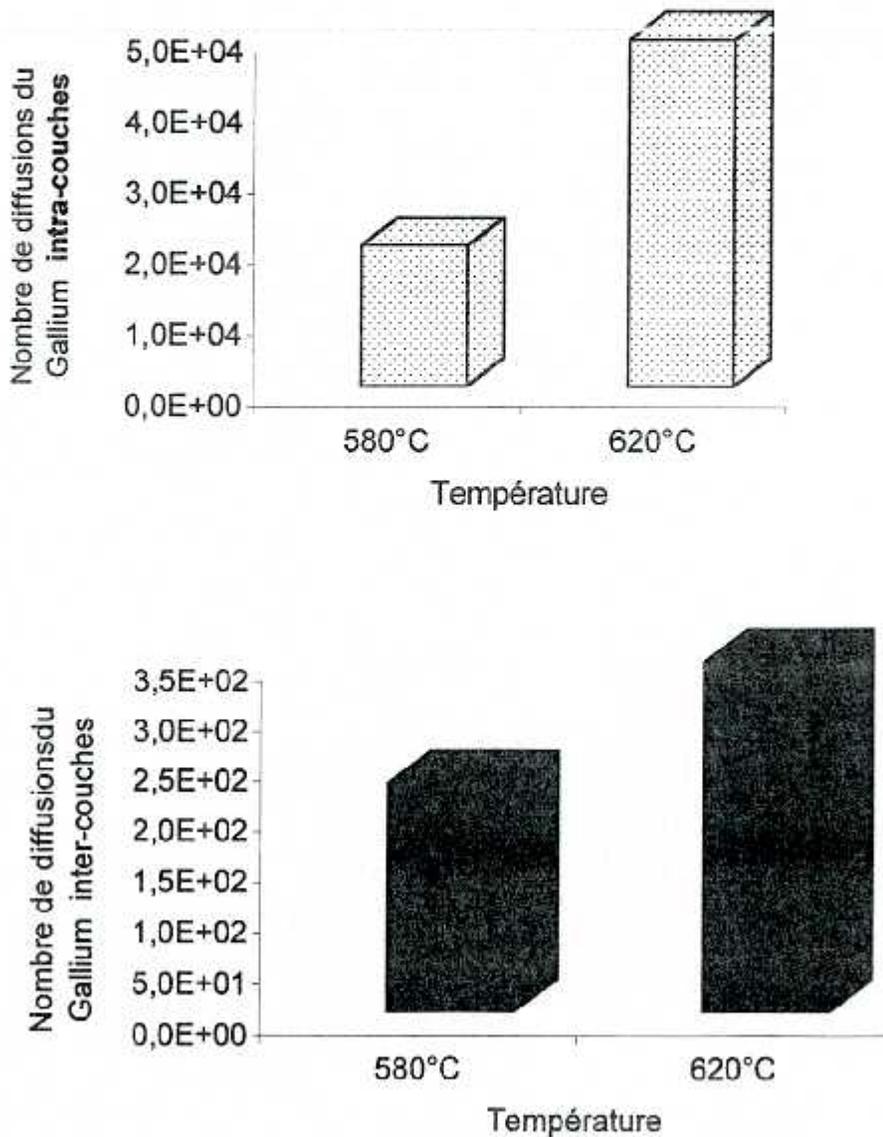


Fig. III-28: Nombre de diffusions en surface pour deux température : 580°C et 620°C et un rapport de flux $\text{As/Ga} = 20$

VI-2-3-3- Effet de la pression sur les oscillations RHEED :

Pour étudier l'effet de la pression d'arsenic sur les oscillations RHEED, nous avons considéré trois valeurs différentes du flux d'Arsenic correspondant ($\alpha_{As} = 1 \text{ s}^{-1}$, $\alpha_{As} = 5 \text{ s}^{-1}$ et $\alpha_{As} = 20 \text{ s}^{-1}$). Le flux de gallium a été maintenu constant ($\alpha_{Ga} = 1 \text{ s}^{-1}$)

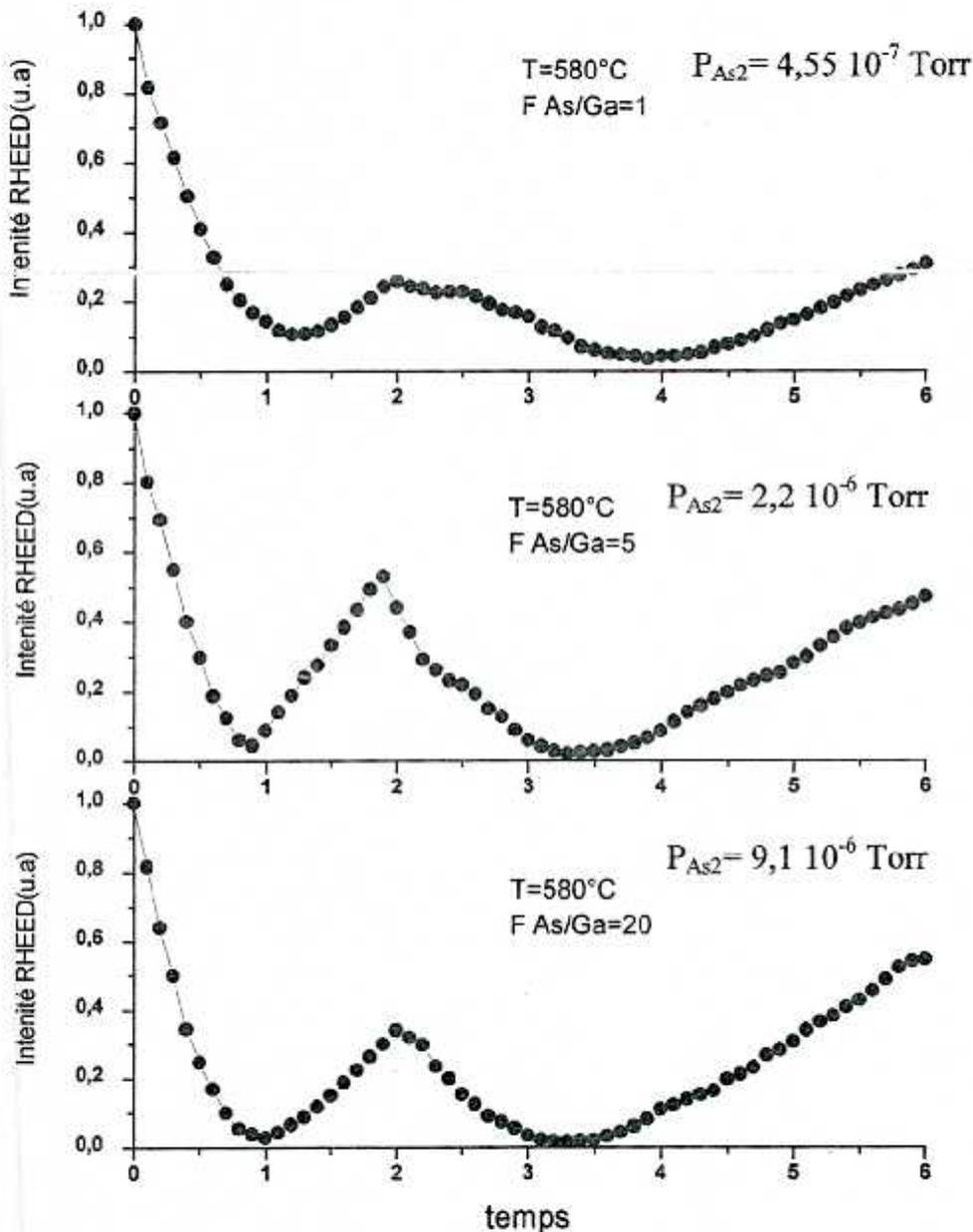


Fig. III-29 : Variation des oscillations RHEED en fonction du temps de croissance pour différentes valeurs de pression d'Arsenic obtenus à travers notre simulateur « SimGaAs2 »

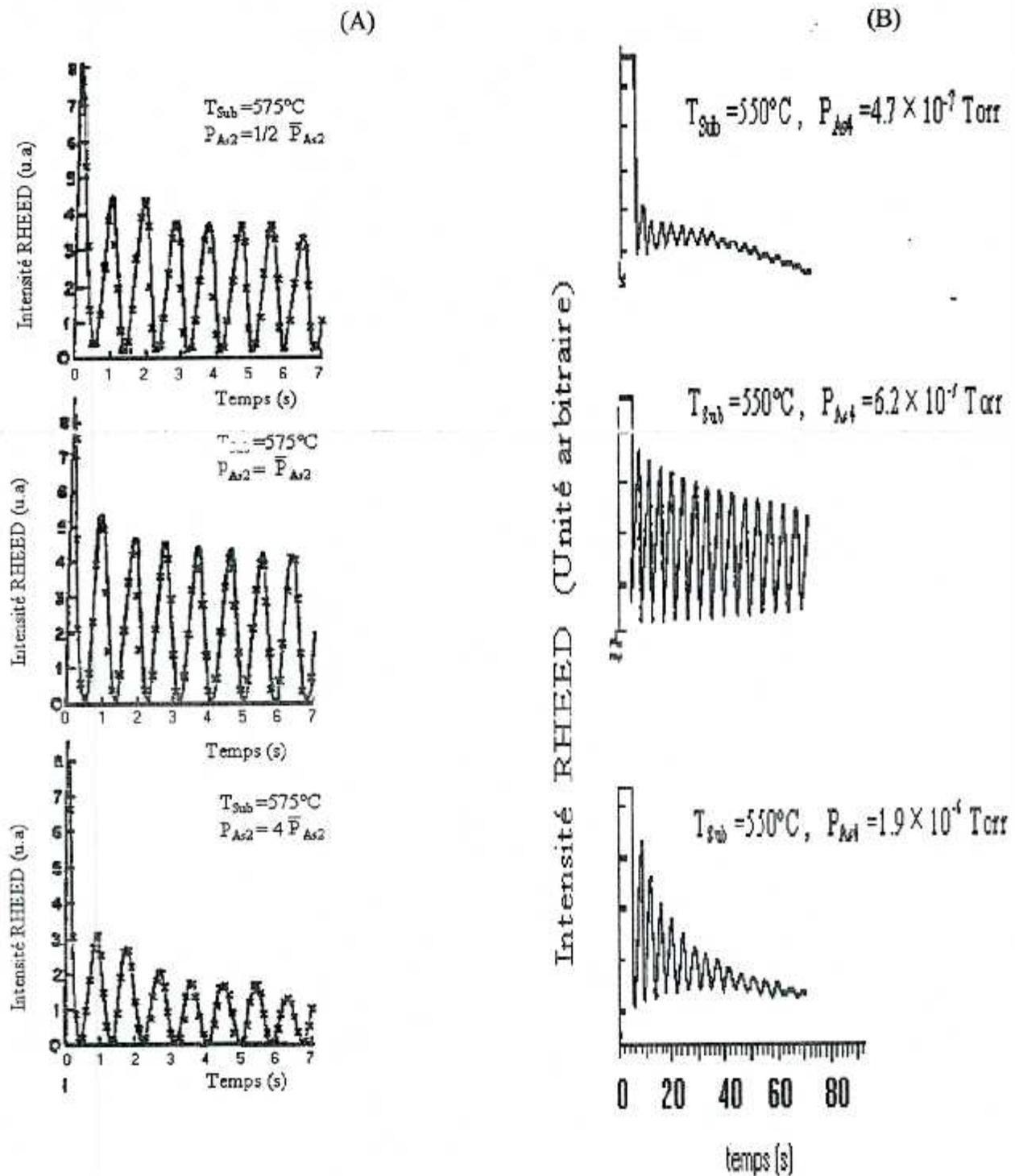


Fig. III-30 : Variation des oscillations RHEED en fonction du temps de croissance pour différentes valeurs de la pression :
 (A) : Résultats de simulation du modèle CDRI de A. Madhukar et al [38].
 (B) : Les résultats expérimentaux [11][70][71].

Nous remarquons sur la figure (III.29) que pour une pression d'Arsenic très faible (de l'ordre de $4,5 \cdot 10^{-7}$ Torr) l'amplitude des oscillations RHEED est faible par rapport à celle obtenue dans le cas d'une pression d'Arsenic plus élevée (de l'ordre de $2,2 \cdot 10^{-6}$ Torr).

En élevant la pression d'Arsenic à une valeur encore plus élevée ($9,1 \cdot 10^{-6}$ Torr), on observe une rediminition de l'amplitude de ces oscillations.

Ceci nous permet de dire que pour une température de croissance donnée, il existe une pression optimale du flux d'Arsenic pour laquelle la qualité des couches est meilleure.

La dépendance des oscillations RHEED aux variations de la pression d'arsenic, a été déjà confirmée expérimentalement [11][70][71] comme le montre la figure(III.30B). Il a été montré qu'à température du substrat et flux de gallium constants il existe une pression optimale d'arsenic (As_4) pour laquelle la surface est moins rugueuse. De même sur le plan théorique, Madhukar et al [38] dans leur modèle CDRI (Configuration Dependent Reaction Incorporation) ont remarqué l'existence d'un flux d'arsenic optimal qui fournit des oscillations plus durables (Fig. III-30A).

VII- REPRESENTATION DE LA MORPHOLOGIE DE LA SURFACE :

La représentation graphique s'avère un moyen utile et commode pour le traitement des résultats obtenus (le volume de fichier 'résultat' est considérable) et pour une meilleure compréhension de la croissance cristalline.

Nous avons représenté la morphologie de la surface pour une température de 620°C et deux rapport de flux. Les figures (III.31) et (III.32) montre une représentation bidimensionnelle de la morphologie de surface, ainsi chaque couche est caractérisée par une couleur. Dans cette représentation nous avons utilisé cinq couleurs :

- ❖ La couleur «jaune» correspond à la surface du substrat.
- ❖ La couleur «vert» caractérise la première couche.
- ❖ La couleur «rouge» caractérise la deuxième couche.
- ❖ La couleur «bleu» caractérise la troisième couche.
- ❖ La couleur «gris» caractérise la quatrième couche.

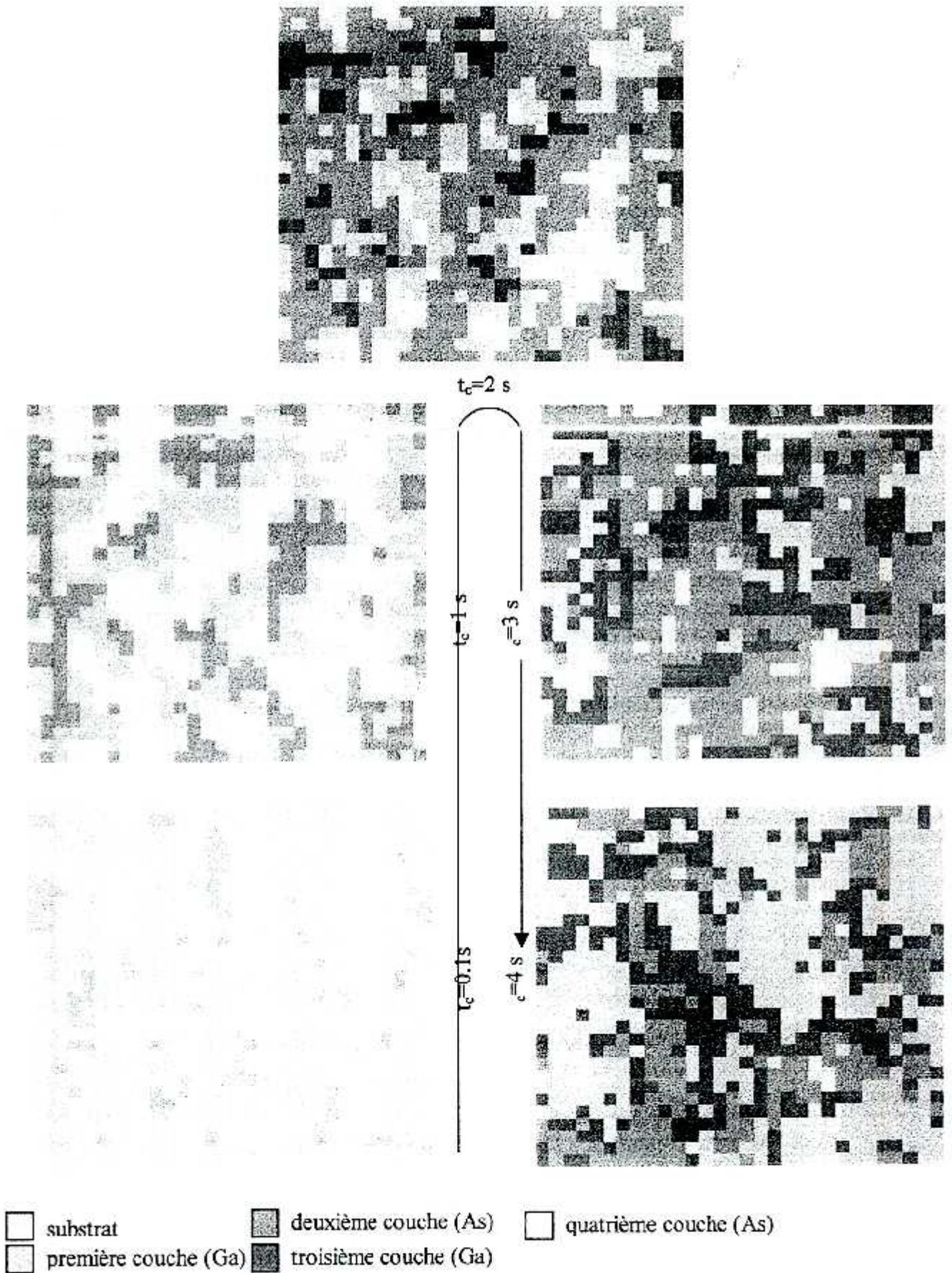


Fig. III-31: Représentation bidimensionnelle de la morphologie de la surface de GaAs de 30×30 sites entre 0.1 et 4 secondes. La température est de 620°C et le rapport des flux égal à 1

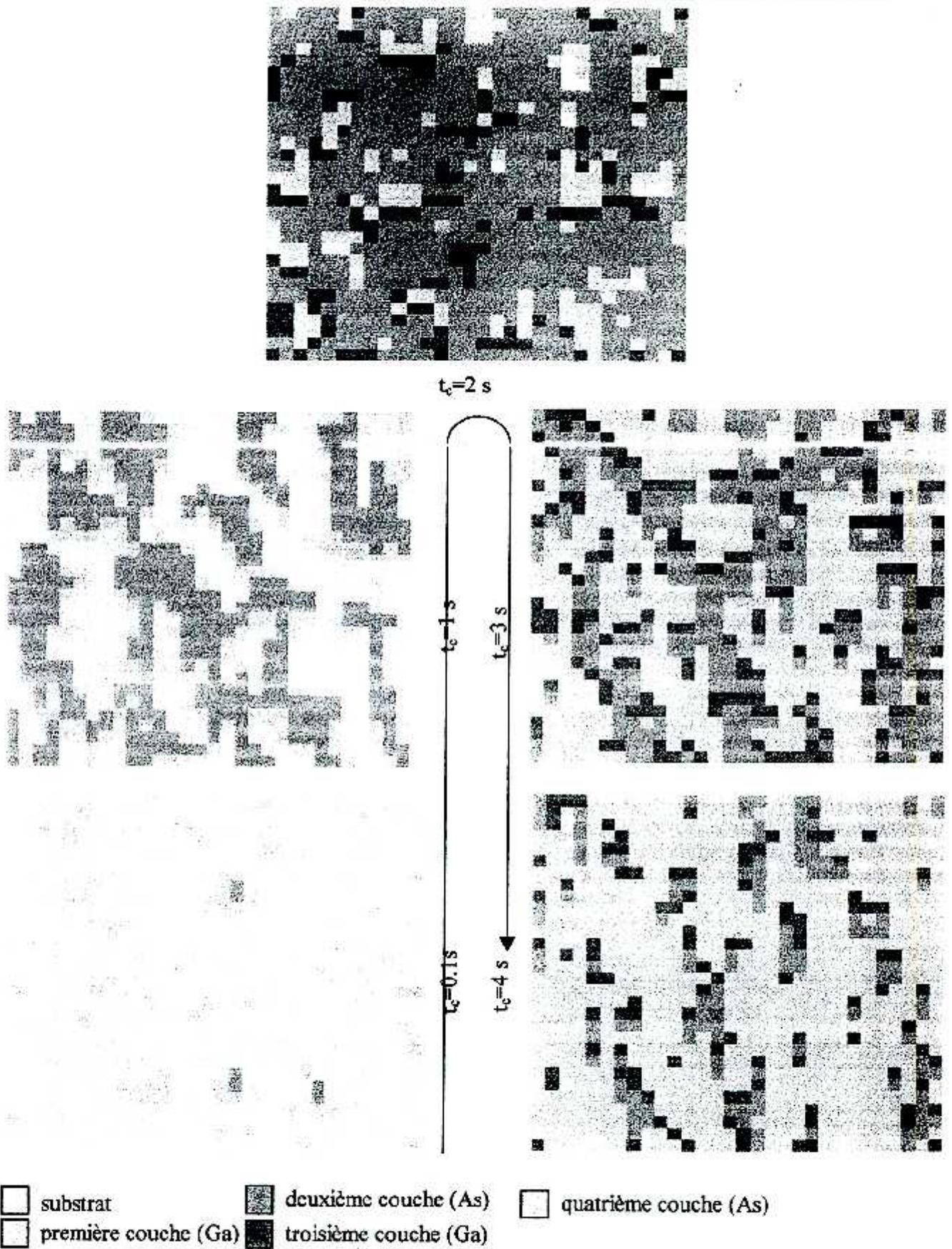


Fig. III-32: Représentation bidimensionnelle de la morphologie de la surface de GaAs de 30×30 sites entre 0.1 et 4 secondes. La température est de 620°C et le rapport des flux égal à 10

Nous remarquons pour les deux temps $t_c = 2$ s et $t_c = 4$ s correspondant aux minimums de rugosité de la figure (III-22), que la densité de marches (représentées sur les figures par le passage d'une couleur à l'autre) dans le cas d'un rapport de flux égal 10 est faible à celle où le rapport de flux es égal à 1.

Sur la figure (III-32) montre bien une surface presque plane pour un rapport de flux $As/Ga = 10$ et une rugosité importante de la surface pour un rapport de flux égal à 1 (Fig. III-31).

Ainsi, pour un rapport de flux $As/Ga = 10$ (Fig III-32), la surface est toujours riche en Arsenic alors la croissance se produit par germination puis par coalescence d'amas bidimensionnels d'atomes d'Arsenic. Dans ce cas les atomes de Gallium qui se déposeront sur les amas seront plus mobiles et migreront vers les coins des marches pour s'incorporer dans les couches inférieures. Suivant ce mécanisme, le mode de croissance est un mode 2D.

Pour un rapport de flux As/Ga égal 1 (Fig III-31), le taux de couverture de la surface en Arsenic est faible et ainsi la diffusion des atomes de Gallium vers les couches inférieures se trouve limitée. La croissance s'opere par formation d'ilots tridimensionnels et le mode de croissance est un mode de 3D.

Conclusion Générale
et Perspectives

CONCLUSION GENERALE

La croissance des couches minces est un phénomène extrêmement complexe. La formation des facettes, la formation de défauts aux interfaces, la rugosité de la surface, sont des phénomènes qui conditionnent le bon fonctionnement des dispositifs.

Dans cette thèse, nous avons consacré l'essentiel de nos efforts à mettre en oeuvre un simulateur de la croissance homoépitaxiale de quatre couches atomiques de GaAs(100) sur une surface plane stabilisée Arsenic en se basant sur les travaux expérimentaux d'Arthur [22-23], Foxon et Joyce [24-26] ainsi que les travaux de simulation de J. Singh [27], A. Madhukar [10] et N.V. Peskov[53]

Une grande partie de notre travail était consacrée à la programmation. Le logiciel SimGaAs2 que nous avons mis au point permet de simuler, à l'échelle atomique, la croissance de GaAs/GaAs(100) à partir d'une source atomique (Gallium) et d'une source moléculaires (Arsenic As₂) en utilisant la méthode de Monte Carlo pour reproduire le mouvement aléatoire de chacun des atomes adsorbé sur la surface. Ce travail présente l'originalité d'introduire la notion des échanges atomique inter-couches par saut de marche.

L'exploitation de SimGaAs2, sous cette nouvelle version, nous a permis d'étudier la dynamique de croissance de GaAs et l'effet de chacun des paramètres de croissance, tel que la pression du flux et la température du substrat, sur le degré de recouvrement de la surface

Nous avons aussi étudié l'évolution du coefficient de diffusion D_{Ga} et la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium l_{moy} en fonction du temps ainsi que l'effet de la température du substrat, prise dans la gamme [530°C -620°C], sur ces derniers. Ces résultats sont en accord avec les travaux de N.V Peskov[53].

L'étude phénoménologique de la diffusion intra-couche et inter-couches lors de la croissance du système GaAs/GaAs(100) et la compréhension de ces phénomènes de base s'est avéré d'un intérêt particulier permettant d'élaborer des stratégies de contrôle de la morphologie des films.

Une étude comparative a été établie pour une meilleure analyse de la croissance de GaAs/GaAs (100). Nous avons montré à travers nos résultats que la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium a un comportement inverse à celui de la rugosité de la surface et que la rugosité de la surface et la densité de marches ont un comportement similaire.

Nous avons montré à travers l'étude de la dynamique de croissance GaAs/GaAs par la technique RHEED, que pour un flux de Gallium et une température du substrat donnés, il existe une pression d'Arsenic optimale pour laquelle la qualité de la surface est meilleure. Ce résultat a été confirmé expérimentalement [70-71] et théoriquement par la simulation de A.Madhukar [38].

En dernier une présentation phénoménologique et morphologique de la surface en cours de croissance est envisagé par SIMGaAs2.

PERSPECTIVES

Pour la continuité de l'effort, trois axes de travail doivent être envisagés :

- Au passage à 16 couches atomiques de GaAs/GaAs(100) le logiciel pourra être considéré complet et pourra être exploité dans la croissance homoépitaxiale multicouches.
- L'exploitation complète des possibilités de la représentation graphique pour en faire un moyen efficace de traitement des résultats.
- Les questions d'interfaces, des défauts en volumes et l'effet des contraintes, par la généralisation à d'autres systèmes (GaInAs par exemple) sur la croissance cristalline. Un travail approfondi sur ce dernier point devra être engagé dans les années à venir.



Appendices

Appendice A

Techniques expérimentales (LPE,VPE)[21] :

L'épitaxie en phase liquide (LPE):

Cette technique consiste à faire croître le cristal par la mise en contact du substrat avec une source liquide. C'est le même principe que le tirage d'un lingot par la méthode Czochralski. Il faut bien contrôler les échanges thermiques pour éviter de liquéfier le cristal existant. Cette méthode présente l'avantage d'être très rapide, la vitesse de croissance peut être de l'ordre du micron par minute mais bien sûr n'a pas du tout la même précision que l'EJM.

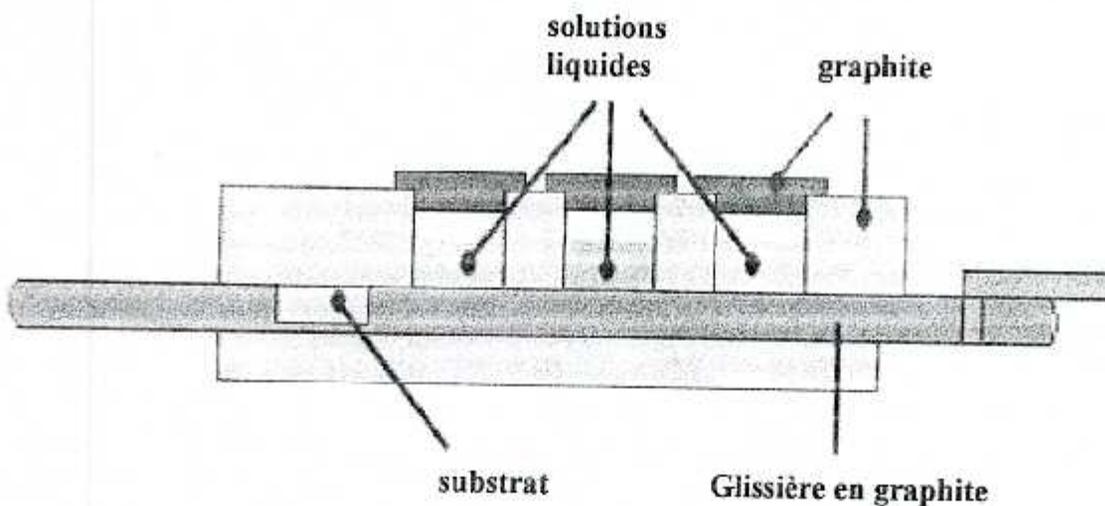


Fig A.1 : Dispositif multibain d'épitaxie en phase liquide. Les solutions peuvent être de matériau ou de dopage différents pour réaliser une hétéroépitaxie [21].

L'épitaxie en phase vapeur (VPE ou CVD) :

Cette opération consiste à faire croître le cristal à partir de sources de gaz contenant les éléments dopants. Dans le réacteur, les gaz se dissocient pour fournir par exemple le silicium qui se dépose à la surface des plaquettes. Pour assurer une bonne croissance ces dernières sont chauffées. Notons que suivant la température de croissance, les réactions mises en jeu sont très

différentes et qu'elles peuvent même conduire à des effets négatifs. Il faudra donc aussi contrôler les équilibres chimiques par injections de gaz résultant de la décomposition de la source.

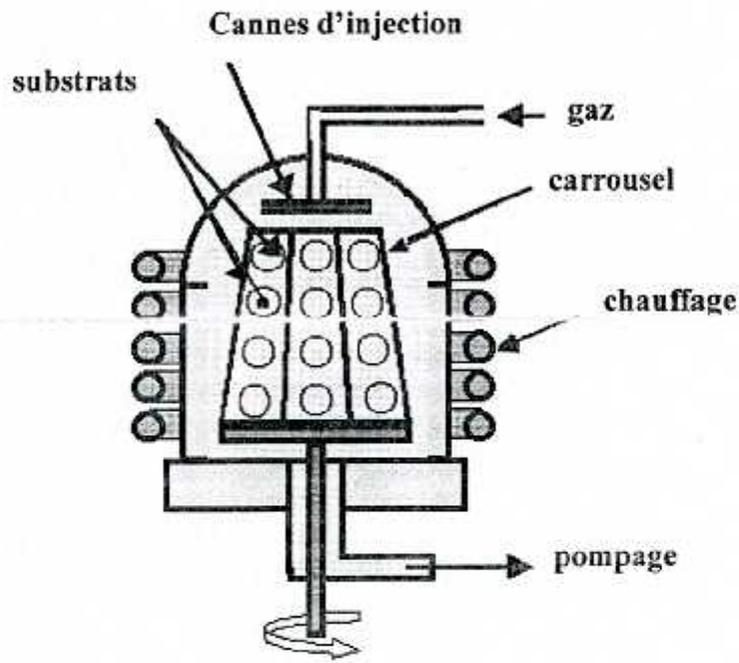


Fig A.2 : Banc d'épitaxie en phase vapeur. Les gaz injectés contiennent en général du trichlorosilane, du HCl et de l'hydrogène[21].

Appendice B

Le tableau (B.1) montre les différents types d'événements possibles pour un atome de Gallium, le symbole et la valeur de chaque type d'événement considérée par notre simulateur.

Type de l'événement	symbole de l'événement	Valeur affectée
Arrivée de Gallium	ArrivGa	1
Migration a` droite	migdrGa	2
Migration a` gauche	migghGa	3
Migration vers l'avant	migavGa	4
Migration vers l'arrière	migarGa	5
Evaporation	evapuGa	6
passage de diedrique vers l'accroché		
Diedrique-Accroché Ga 1	DAccGa1	7
Diedrique-Accroché Ga 2	DAccGa2	8
Diedrique-Accroché Ga 3	DAccGa3	9
Diedrique-Accroché Ga 4	DAccGa4	10
Diedrique-Accroché Ga 5	DAccGa5	11
Diedrique-Accroché Ga 6	DAccGa6	12
Diedrique-Accroché Ga 7	DAccGa7	13
Diedrique-Accroché Ga 8	DAccGa8	14
passage de l'accroché vers diedrique		
Accroché-Diedrique 9	AccDGa9	15
Accroché-Diedrique 10	AccDGa10	16
Accroché-Diedrique 11	AccDGa11	17
Accroché-Diedrique 12	AccDGa12	18
Accroché-Diedrique 13	AccDGa13	19
Accroché-Diedrique 14	AccDGa14	20
Accroché-Diedrique 15	AccDGa15	21
Accroché-Diedrique 16	AccDGa16	22
Evaporation des Accrochés		
evaporation AccrochéGa1	EvpAcDGa1	23
evaporation AccrochéGa2	EvpAcDGa2	24
evaporation AccrochéGa3	EvpAcDGa3	25
evaporation AccrochéGa4	EvpAcDGa4	26

Tab B.1 : Le symbole et la valeur affectés à chaque type d'événement possible à un atome de Gallium

Le tableau (B.2) montre les différents types d'événements possibles pour un atome de Arsenic, le symbole et la valeur de chaque type d'événement considérée par notre simulateur.

Type de l'événement	symbole de l'événement	Valeur affectée
Arrivée de l'Arsenic	Arriasph	27
Migration a` droite	migdrAs	28
Migration a` gauche	miggAs	29
Migration vers l'avant	migavAs	30
Migration vers l'arrière	migarAs	31
Evaporation chimisorbé	evpchmol	32
passage de diedrique vers l'accroché		
Diedrique-Accroché As 1	DAccAs1	33
Diedrique-Accroché As 2	DAccAs2	34
Diedrique-Accroché As 3	DAccAs3	35
Diedrique-Accroché As 4	DAccAs4	36
Diedrique-Accroché As 5	DAccAs5	37
Diedrique-Accroché As 6	DAccAs6	38
Diedrique-AccrochéAs 7	DAccAs7	39
Diedrique-Accroché As 8	DAccAs8	40
passage de l'accroché vers diedrique		
Accroché-Diedrique 9	AccDAs9	41
Accroché-DiedriqueAs 10	AccDAs10	42
Accroché-DiedriqueAs 11	AccDAs11	43
Accroché-Diedrique As 12	AccDAs12	44
Accroché-DiedriqueAs 13	AccDAs13	45
Accroché-Diedrique As 14	AccDGa14	46
Accroché-DiedriqueAs 15	AccDAs15	47
Accroché-DiedriqueAs 16	AccDAs16	48

Tab B.2 :Le symbole et la valeur affectés à chaque type d'événement possible à un atome d'Arsenic

APPENDICE C

HYBRIDATION sp^3 :

Dans les molécules à forte symétrie ou dans les solides, les orbitales moléculaires peuvent être déterminées à partir des considérations de symétrie. On peut ainsi passer directement au calcul de l'énergie. C'est le cas de l'hybridation sp^3 que l'on rencontre dans tous les semi-conducteurs qui ont une structure de Zinc Blende

Ces orbitales hybrides résultent de la combinaison d'une orbitale S et de trois orbitales P pures. La forme de ces orbitales est notablement différente de celle d'une orbitale S ou d'une orbitale P.

Dans le cas du GaAs les configurations électroniques sont données par le tableau suivant

Symbole de l'élément	N^0 atomique	Configuration électronique
Ga	31	$1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^6 3D^{10} 4S^2 4P^1$
As	33	$1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^6 3D^{10} 4S^2 4P^3$

Ces configurations sont déterminées par la règle de HUND, qui a été déduite des observations spectroscopiques, et qui s'exprime de la façon suivante :

« dans les atomes à l'état fondamental, les électrons d'un même état se disposent de manière à occuper le plus grand nombre possible d'orbitales de cet état, et leurs spin sont parallèles dans la mesure du possible »

Appendice D

L'expression complète de Musgrave et Pople [58] dans le cas d'une structure zinc blende est une relation très complexe mettant en jeu tous les types de contraintes comme le montre la relation suivante :

$$E_C = \frac{1}{2}K_r \sum (\delta_{ij})^2 + K_{rr} \sum (\delta_{ij})(\delta_{r_{jk}}) + \frac{1}{2}r_0^2 K_\theta \sum (\delta\theta_{ijk})^2 + r_0 K'_{r\theta} \sum (\delta r_{ij})(\delta\theta_{ijk}) + \quad D-1$$

$$r_0 K''_{r\theta} \sum (\delta r_{ij})(\delta\theta_{ijl}) + r_0^2 K'_{\theta\theta} \sum (\delta\theta_{ijk})(\delta\theta_{ijl}) + r_0^2 K''_{\theta\theta} \sum (\delta\theta_{ijk})(\delta\theta_{ijm})$$

$K_r, K_{rr}, K_\theta, K_{r\theta}, K'_{r\theta}, K''_{r\theta}, K'_{\theta\theta}$ et $K''_{\theta\theta}$ sont des constantes de force.

$\delta\theta_{ijk} = \theta_{ijk} - \theta_0$ avec θ_{ijk} est l'angle formé par les trois atomes i, j et k

θ_0 est l'angle à l'équilibre égale $109^\circ 28'$.

$\delta r_{ij} = r_{ij} - r_0$ avec r_{ij} est la longueur de liaison entre l'atome i et l'atome j.

r_0 est la longueur de liaison à l'équilibre égale $\frac{\sqrt{3}}{4} a$,

Nous donnons une expression plus simplifiée sous une forme quadratique ne considérant que les variations angulaires et nous négligeons les déformation des longueurs de liaisons par rapport à celle des angles, ce qui nous donne la relation D-2, utilisée dans notre simulation :

$$E = \sum_{i,j>i}^4 K_\theta (\Delta\theta_{ij})^2 \quad D-2$$

K_θ est la constante de force est égale à 1.1 pour le GaAs[42]

$\Delta\theta_{ij}$ est la variation de l'angle formé par les liaisons i et j

$(\Delta\theta_{ij}) = (\theta_{ij} - \theta_0)$, où θ_{ij} est l'angle après déformation et θ_0 est l'angle à l'équilibre.

Appendice E

La procédure de Génération des Nombres Pseudo-Aléatoires (GNPA)

L'algorithme ci dessous (nommé : GENERA) permet de Générer des Nombres Pseudo-Aléatoires (GNPA) dans l'intervalle $[0 - 1]$ avec une fréquence de $M/4$ [49] où M est un nombre de la forme 2^b .

Pour lancer la procédure de GNPA, la valeur de N est initialisée à une valeur donnée N_0 (par exemple $N_0 = 5$).

```
void GENERA()
{
   $N_1 = (5 \times N)/M;$ 
   $N = 5 \times N - N_1 \times M;$ 

   $N_2 = (11 \times N)/M;$ 
   $N = 11 \times N - N_2 \times M;$ 

   $N_3 = (13 \times N)/M;$ 
   $N = 13 \times N - N_3 \times M;$ 

   $z = 1. \times N/M;$ 
}
```

N_i : est un nombre pseudo-aléatoire réel généré à la i^{ime} itération.

Z : est le nombre pseudo-aléatoire réel et final utilisé dans la simulation.

Prenons l'exemple suivant :

1/ $b=5$ $M=32$

N°	Z	N°	Z
1	$z=7.187500e-01$	13	$z=2.187500e-01$
2	$z=9.062500e-01$	14	$z=4.062500e-01$
3	$z=9.687500e-01$	15	$z=4.687500e-01$
4	$z=6.562500e-01$	16	$z=1.562500e-01$
5	$z=2.187500e-01$	17	$z=7.187500e-01$
6	$z=4.062500e-01$.	.
7	$z=4.687500e-01$.	.
8	$z=1.562500e-01$.	.
9	$z=7.187500e-01$.	.
10	$z=9.062500e-01$.	.
11	$z=9.687500e-01$.	.
12	$z=6.562500e-01$	24	$z=1.562500e-01$

Tab E.1 : Séquence de nombres pseudo-aléatoire générer pour une valeur de $M=32$.

2/ $b=8$ $M=256$

N°	Z	N°	Z	N°	Z
1	$z=9.648438e-01$	31	$z=9.335938e-01$	61	$z=6.523438e-01$
2	$z=8.632812e-01$	32	$z=5.195312e-01$	62	$z=4.257812e-01$
3	$z=2.460938e-01$	33	$z=4.648438e-01$	63	$z=4.335938e-01$
4	$z=9.570312e-01$	34	$z=3.632812e-01$	64	$z=1.953125e-02$
5	$z=2.773438e-01$	35	$z=7.460938e-01$	65	$z=9.648438e-01$
6	$z=3.007812e-01$	36	$z=4.570312e-01$	66	$z=8.632812e-01$
7	$z=5.859375e-02$	37	$z=7.773438e-01$	67	$z=2.460938e-01$
8	$z=8.945312e-01$	38	$z=8.007812e-01$	68	$z=9.570312e-01$
9	$z=5.898438e-01$	39	$z=5.585938e-01$.	.
10	$z=7.382812e-01$	40	$z=3.945312e-01$.	.
11	$z=8.710938e-01$	41	$z=8.984375e-02$.	.
12	$z=8.320312e-01$	42	$z=2.382812e-01$.	.
13	$z=9.023438e-01$	43	$z=3.710938e-01$.	.
14	$z=1.757812e-01$	44	$z=3.320312e-01$.	.
15	$z=6.835938e-01$	45	$z=4.023438e-01$.	.
16	$z=7.695312e-01$	46	$z=6.757812e-01$.	.
17	$z=2.148438e-01$	47	$z=1.835938e-01$.	.
18	$z=6.132812e-01$	48	$z=2.695312e-01$.	.
19	$z=4.960938e-01$	49	$z=7.148438e-01$.	.
20	$z=7.070312e-01$	50	$z=1.132812e-01$.	.
21	$z=5.273438e-01$	51	$z=9.960938e-01$.	.
22	$z=5.078125e-02$	52	$z=2.070312e-01$.	.
23	$z=3.085938e-01$	53	$z=2.734375e-02$.	.
24	$z=6.445312e-01$	54	$z=5.507812e-01$.	.
25	$z=8.398438e-01$	55	$z=8.085938e-01$.	.
26	$z=4.882812e-01$	56	$z=1.445312e-01$.	.
27	$z=1.210938e-01$	57	$z=3.398438e-01$	125	$z=6.523438e-01$
28	$z=5.820312e-01$	58	$z=9.882812e-01$	126	$z=4.257812e-01$
29	$z=1.523438e-01$	59	$z=6.210938e-01$	127	$z=4.335938e-01$
30	$z=9.257812e-01$	60	$z=8.203125e-02$	128	$z=1.953125e-02$

Tab E.2 : Séquence de nombres pseudo-aléatoire générer pour une valeur de $M=256$.

On remarque que la suite des nombres générés se répète après une période de 8 pour le premier cas et 64 pour le deuxième cas qui correspond à une période de $M/4$.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] J.W. Gibbs
Collected Works (Yale University Press, New Haven, 1957).
- [2] M. Volmer and A. Weber
Z. phys. chem, Vol 119, 227 (1926).
- [3] W. Kossel
Nachr. Ges. Wiss. Gottingen, pp. 135, 1927.
- [4] W.K. Burton, Cabrera and F. C. Frank
Phil. Trans. Roy. Soc (LONDON) A243 p.299, 1951.
- [5] F.F. Abraham and G.M. White
J. Appl. Phys 41, 1841, (1970).
- [6] J.D. Weeks, G.H. Gilmer and K.A. Jackson
analytical theory of crystal growth
J. Chem. Phys, Vol. 65, N^o.2, 15 July 1976.
- [7] G. H. Gilmer
J. Cryst. Growth 49, 465, (1980).
- [8] A. Trayanov and D. Kaschiev
Growth shape of crystallites on substrate : a Monte Carlo simulation
J. Cryst. Growth 78(1986) 399-407.
- [9] L. Alexandrov
Growth of crystal in semiconductor materials on crystal surface
Elsevier. Sciences publishers B. V, (1984).
- [10] A. Madhukar
Surf. Sci 132, 344 (1983).
- [11] A. Madhukar and S.V. Ghaisas
Application of the configuration dependent reactive incorporation growth process for the
Group V pressure and substrate temperature dependence of III-V molecular beam
epitaxial growth and dynamic of the reflection high energy electron diffraction intensity
Appl. Phys. Lett 47(1985)247.
- [12] S.V. Ghaisas and A. Madhukar
Role of surface molecular reaction in influencing the growth mechanism and the nature
of non equilibrium surfaces: A Monte Carlo of molecular beam epitaxy
Phys. Rev. Lett, Vol 56, N^o10, p.1066-1069, Mars 1986.
- [13] M. Tomson, S.V. Ghaisas and A. Madhukar
Examination of the nature of lattice matched III-V semiconductor interfaces using
computer simulated molecular beam epitaxial growth
J. Cryst. Growth. 84 (1987) 79-97
- [14] M. Djafari Rouhani, A. Mgué, H. Camon et G. Cohen Dolal
Atomic scale simulation of microtechnologies
L'Onde Electrique. vol.72-N^o2. Mars-Avril 1994.

- [15] M.P. Allen and D.J. Tildesley
Computer simulation of liquids
Oxford Science Publication, 1994.
- [16] E. Pearson, T. Takai, T. Halicioglu and W.A Tiller
J. Crystal. Growth, 70, 33, (1984)
- [17] H. Balmane, T. Halicioglu and W.A Tiller
J. Crystal. Growth, 85, 16, (1987)
- [18] P.N. Keating
Effect of invariance requirements on the elastic strain energy of crystals with application
to the diamond structure.
Phys. Rev. Vol. 145, N^o 2, May 1966
- [19] S. Bacciredo
Thèse de Doctorat de l'Université Paul Sabatier de Toulouse (juin 1981)
- [20] M. Ohring
Materials Sciences Of Thin Films
Eddition Acadimic Press 2002.
- [21] http://www.univ-lille1.fr/eudil/ejm/part_a.html
- [22] J.R. Arthur
Surf. Sc. 37.3057 (1966)
- [23] J.R. Arthur
Surf. Sc. 43. 449 (1966)
- [24] C.T. Foxon, M. R. Boudary and B.A . Joyce
Surf. Sc. 44. 69 (1974)
- [25] C.T. Foxon and B.A . Joyce
Surf. Sc. 50. 434 (1975)
- [26] C.T. Foxon and B.A . Joyce
Surf. Sc. 64. 293 (1977)
- [27] J. Singh and A. Madhukar
Jour. Vac. Sc. Tech. 20, 716 (1982)
- [28] H.H. Farrell, J. P. Harbison and L.D. peterson
Molecular beam epitaxy growth mechanisms on GaAs (100) surfaces
Jour. Vac. Sc. Tech. B5(5), (sept/oct. 1987) 1482 -1489
- [29] J. Singh and A. Madhukar
Prediction of kinetically Controlled surface roughening : A montc Carlo computer
simulation study
Phys. Rev. Lett. Vol 51 , N9 (1983)
- [30] J. Cazaux
Initiation à la physique de solide
Edition Masson (Paris 1989)

- [31] C. Pisani
Quantum mechanical ab-initio calculation of the properties of crystalline materials
Edition Springer (1996)228-230.
- [32] A. Amrani
Thèse de Doctorat de l'Université Paul Sabatier de Toulouse(juillet 1988).
- [33] M. Thomsen and A. Madhukar
J. Crist. Growth. 84 (1987) 98-114
- [34] A. Ali Messaoud
Thèse de Magister Blida (1997)
- [35] B.A. Joyce
Rep. Prog. Phys. 37(1974)390-394
- [36] T. Kawamura and A. Ishii
Role of As during homoepitaxial growth on GaAs(001) studied using Monte Carlo simulation
Surf. Sci. 438 (1999) 155-161
- [37] T. Kawamura, J.Maruta and A. Ishii
Surface morphology development during molecular beam epitaxy growth on a GaAs(001) vicinal surface
Jpn. J. Appl. Phys. Vol39(2000)4376-4379
- [38] A. Madhukar and S. Ghaiasas
The natural of molecular beam epitaxial growth examined via computer simulations
Depart. of physics and Depart. of Materials Science, University of Southern California
Los Angeles(1988)-45
- [39] J. Sing and K. K.Bajaj
Theoretical investigation of the nature of the normal and inverted GaAs-AlGaas structure growth by molecular epitaxy
J. Vac. Sci. Tech. Vol 2 N° 3(1984)
- [40] M. Larroussi
Thèse de Doctorat de l'Université Paul Sabatier de Toulouse(décembre 1990)
- [41] J. D. Torre
Thèse de Doctorat de l'Université Paul Sabatier de Toulouse(décembre 2000)
- [42] R. M. Martin Elastic Properties of ZnS structure semiconductors.
Phys. Rev. B. 1, 4005(1970)
- [43] H. Rucker and M. methfessel
Phys. Rev. B. 52, 11059(1995)
- [44] K. Kim, W. R. L. Lambrecht and B. Segall
Phys. Rev. B. 53, 16310(1996)
- [45] M.J.P.Musgrav and J.A. Pople
A general valence force field for diamond
Proc. Roy. Soc. A268, 474(1962)

- [46] D. Boltaks
Diffusion et défauts ponctuels dans les semi-conducteurs
Edition MIR (Moscou 1977)
- [47] J. M. Hamersley et D.C. Handscomb*Les méthodes de Monte Carlo
Edition Dunod Paris(1967).
- [48] K. Abou Dagga
Thèse de Magister Egypt(1997)
- [49] H.M. Elsaid
Thèse de Magister Egypt (1984)
- [50] S.B. Ogale, A. Madhukar and M. Thomsen
Molecular beam epitaxial growth of III-V compound Semiconductors in the presence of
low energy ion beam : A Monte Carlo simulation study
App. Phys. Lett. Vol 51, N°11(1987)
- [51] R. Kaspi and S.A. Barnett
Surf. Sci. 241(1991)149-156
- [52] N.V. Peskov
Comp. Phys. Comm. Aa(1993)64-68
- [53] N.V. Peskov
Surf. Sci. 306(1994)227-232
- [54] F. Turco
Thèse de Doctorat de l'Institut National Polytechnique de Grenoble(1988)
- [55] Bisaro et B. Bartenlian
Nanotechnologies et Micromachines
Edition Masson 1992
- [56] A. Vassiliev
Introduction à la physique statistique
Edition MIR Paris(1985) 36-38
- [57] D. Karchiev
J. Cryst. Growth. 40 (1977)29
- [58] S. V. Ghaisas and A. Madhukar
J. Vac. Sci. Technol. B3(2), p540, 1985
- [59] N. Fazouen
Thèse de Doctorat de l'Université Paul sabatier de Toulouse (1994)
- [60] T. Shitara, D.D. Vvedensky, M.R. Wilby, J. Zhang, J.H. Neave and B.A. Joyce
Step density variation and reflection high energy electron diffraction intensity
oscillations during epitaxial growth
Phys. Rev. B. Vol 46, N°11, (1992)
- [61] S. Nagata and T. tanaka
J. Appl. Phys. 48, 940(1977)

- [62] M. Uwaha and Y. Saito
Phy.Rev.Vol 68,N°2,(1992)
- [63] Neave, Joyce,Dobson et Norto
App,Phy,A31,1983
- [64] D.D. Vvadensky,N. Haider,T. Shitara and P. Smilauer
Phil.Trans.R.Soc.Lond.A,344,493-505(1993)
- [65] T.Shitara
Ph.D thèse, Université de Londres,1992
- [66] I.K. Markos and S. Das Samara
Atomic numerical study of molecular beam epitaxy growth kinetics
Phy.Rev.B.Vol 45 N°5(1992)
- [67] A.Y. Cho
J.Vac.Sci.Technol.31,P.241,1971
- [68] J.M. Van Hove ,C.S.Lent, P.R.Pukite and P.I.Cohen
J.Vac.Sci.Technol.B1,741(1983)
- [69] D. David
Méthodes avancées de caractérisation des surfaces
Edition MASSON(1992)
- [70] J.P. Van Der Eerden and P.Bennema
Prog. Crist. Growth.Charat. Vol 11 (1978)219-254
- [71] B.F.Lewis, F.J.Grunthaner,A.Madhukar,T.C.Lee and R.Fernandez
J.Vac.Sci.Technol.B3(5),(1985)1317-1322.

RESUME

L'objectif que nous nous somme fixé, dans cette thèse, est la mise au point d'un outil informatique capable de simuler la croissance par épitaxie par jet moléculaires de quatre couches atomiques de GaAs/GaAs (100), basé sur la méthode de Monté Carlo.

Dans cette simulation, nous avons envisagé deux approches : la première est basée la théorie de la cinétique chimique et la seconde qui est basée sur l'aspect aléatoire des événements ayant lieu sur la surface, utilise la méthode de Monte Carlo pour le suivie temporel de l'évolution de la configuration et par suite la morphologie.

Ce travail a abouti à la détermination pour le système GaAs/GaAs (100) :

- 1- L'évolution globale de la couverture en fonction du temps.
- 2- Les paramètres et les conditions agissant sur la croissance des quatre couches atomique du système considéré.
- 3- Le coefficient de diffusion D_{Ga} des adatoms de Gallium au cours de la croissance.
- 4- La forme oscillatoire de la courbe décrivant l'évolution de la longueur moyenne de diffusion des adatoms de Gallium en fonction du temps

En vue d'analyser la croissance du système GaAs/GaAs (100), nous avons tenté de trouvé une relation simple et directe entre le comportement de l'intensité RHEED et la dynamique de la surface. Il s'est avéré que la densité de marches et la rugosité en surface fournissent des informations qualitatives de l'évolution de l'intensité RHEED et du mode de croissance.

Mots clés : EJM, GaAs/GaAs (100), Monte Carlo, D_{Ga} , L_{moy} , Rugosité, RHEED, Morphologie de surface.

ABSTRACT

The objective that we have fixed in this thesis, is to develop a computer tool able to simulate the molecular beam épitaxy growth GaAs/GaAs (100), based upon the Monte Carlo method.

In this simulation, we considered two approaches: the first one is based on the chemical kinetics theory and the second one is based on the random event that occur on the surface, and used the Monte Carlo method to look at the temporal evolution of the configuration and hence the morphology.

The results obtained from this study provided:

- 1 - the global coverage build-up as a fonction of growth time for GaAs/GaAs(100).
- 2 - the growth parameters and conditions for the deposition of four atomic layers of GaAs on GaAs(100) substrate.
- 3 - the diffusion coefficient (D_{Ga}) of the Gallium adatomesees during the growth.
- 4 - the oscillatory shape of the curve describing the evolution of the middle length of diffusion of adatomesees of Gallium according to the time.

In order to examine the growth of the system GaAs/GaAs (100) via computer simulation we have attempted at finding a simple and direct relation between the behavior of the RHEED intensity and the dynamics of the surface morphology and growth mode

Key words: MBE, GaAs/GaAs (100), Monte Carlo, D_{Ga} , L_{moy} , Roughness, RHEED, Morphology of surface.

ملخص

الهدف الذي حددناه في هذه المذكرة هو تصميم برنا مج إعلام آلي بواسطة الكمبيوتر الذي أسميناه «SimGaAs» قادر على وصف النمو الطبقي الناتج عن إرسال حزمة من جزيئات الزرنيخ (As_2) وذرات الغاليوم (Ga) على سطح (GaAs) بالاتجاه $<100>$.

لتحقيق هذا الوصف على الكمبيوتر استعملنا طريقة مونتى كارلو لإدارة الحوادث العشوائية التي تطرأ على السطح أثناء النمو الطبقي خلال الزمن .

توصلنا في هذا العمل إلى تحديد :

1-التغير الآلي لنمو أربع طبقات (GaAs) .

2-العوامل والظروف المؤثرة على نمو أربع طبقات (GaAs).

3-تغير الطول المتوسط لانتشار ذرات الغاليوم خلال الزمن و في مجال درجة حرارة $[530^{\circ}c - 620^{\circ}c]$.

4-تغير معامل إنتشار ذرات الغاليوم خلال الزمن و في مجال درجة حرارة $[530^{\circ}c - 620^{\circ}c]$.

وفي الجزء الأخير من هذه الدراسة قمنا من جهة بمقارنة تغير قساوة السطح مع كثافة التدرج و من جهة أخرى قساوة السطح مع الطول المتوسط لانتشار ذرات الغاليوم .

ومن أجل دراسة تحليلية لنمو الجملة البلورية GaAs/GaAs حاولنا إيجاد علاقة بسيطة و مباشرة بين تغير « الريد و الحركات المؤثرة على مورفولوجية السطح »

الكلمات الأساسية : النمو الطبقي بإرسال حزمة من الجزيئات، مونتى كارلو، الطول المتوسط لانتشار ذرات الغاليوم، معامل انتشار ذرات الغاليوم، قساوة السطح، الريد .