

Synthèse de films de diamant par plasmas micro-ondes distribués :

approche couplée modèle/expérience

Laboratoire des Sciences des Procédés et des Matériaux – UPR CNRS 3407

Opération de recherche : **Diamant et Matériaux Carbonés**

Encadrante : **Audrey Valentin** (01 49 40 34 18, audrey.valentin@lspm.cnrs.fr)

Directeur de thèse : **Fabien Bénédic** (01 49 40 34 23, fabien.benedic@lspm.cnrs.fr)

La croissance par procédé PECVD (Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition) de couches de diamant comportant un taux très faible de défauts cristallins, des orientations cristallines bien déterminées et une haute qualité microstructurale, sur la plus large surface possible, est un enjeu majeur pour l'émergence d'applications performantes. Des travaux récents menés au LSPM ont montré que les réacteurs à plasmas micro-ondes distribués permettent d'élaborer les différentes formes de diamant CVD, poly- et mono-cristallines, sur des surfaces supérieures ou égales à 10 cm de diamètre, ce qui n'est pas possible avec les procédés micro-ondes conventionnels fonctionnant en cavité résonnante et présente de fait un réel avantage pour différents types d'applications [1].

Si la faisabilité de films de diamant sur de grandes surfaces en utilisant cette technologie nouvelle a été démontrée, l'optimisation des caractéristiques des couches de diamant repose sur la connaissance et le contrôle des mécanismes de croissance en fonction des conditions opératoires (pression de travail, composition gazeuse, puissance micro-onde, température du substrat...). Cela nécessite à la fois des études expérimentales et le développement d'outils numériques capables de faire le lien entre les conditions expérimentales, la composition du plasma, les interactions entre les espèces actives avec la surface du substrat et du film, la vitesse de croissance des différentes faces cristallines et la morphologie/texteure finale de la couche déposée. Pour ces études, le laboratoire dispose depuis plusieurs années de modèles plasmas [2], d'un modèle géométrique macroscopique de la croissance [3] et, plus récemment, d'un modèle Monte-Carlo cinétique qui fait le lien entre les deux premiers outils numériques [4].

Dans ce contexte, le sujet de thèse proposé s'intéressera à l'étude et au contrôle de la croissance de films de diamant poly- et mono-cristallin en plasma micro-ondes distribués sur des surfaces jusqu'à 20 cm de diamètre. Le travail s'appuiera sur une démarche couplant des expériences de croissance cristalline et de diagnostics plasma et l'utilisation des outils de modélisation décrit précédemment, plus particulièrement du code Monte-Carlo cinétique qu'il conviendra de finaliser, afin de maîtriser les mécanismes de croissance en vue de produire des films de diamant possédant des propriétés adaptées à différentes applications.

Bibliographie

- [1] C. Mahi, C.Y. Dulaud, O. Brinza, R. Issaoui, A. Tallaire, J. Achard, F. Bénédic, Synthesis of large-area polycrystalline diamond films and multi-sample single-crystals using a distributed antenna array microwave system, ICDCM 2021, 6-9 septembre 2021.
- [2] K. Hassouni, O. Leroy, S. Farhat, A. Gicquel, Modeling of H₂ and H₂/CH₄ Moderate-Pressure Microwave Plasma Used for Diamond Deposition, Plasma Chemistry and Plasma Processing. **18** (1998) 325–362. <https://doi.org/10.1023/A:1021845402202>.
- [3] F. Silva, J. Achard, X. Bonnin, A. Michau, A. Tallaire, O. Brinza, A. Gicquel, 3D crystal growth model for understanding the role of plasma pre-treatment on CVD diamond crystal shape, Physica Status Solidi (a). **203** (2006) 3049–3055. <https://doi.org/10.1002/pssa.200671101>.
- [4] A. Valentin, O. Brinza, S. Farhat, J. Achard, F. Bénédic, 3D kinetic Monte-Carlo simulations of diamond growth on (1 0 0) surfaces, Diamond and Related Materials, **123** (2022) 108865. [10.1016/j.diamond.2022.108865](https://doi.org/10.1016/j.diamond.2022.108865)