

Auto-assemblage et calibration en taille des nanostructures 1D

H. Dreysse, V. Tokar

Un modèle de gaz sur réseau pour les épitaxies sous contraintes

Les nanostructures cohérentes (comme les pointes quantiques) suscitent actuellement beaucoup d'attention car elles sont considérées comme les éléments constitutifs des dispositifs en nanoélectronique. Leur production en masse est supposée se faire par un auto-assemblage qui prend place dans une épitaxie sous contrainte. Ce dernier phénomène est difficile à simuler numériquement à cause du caractère continu des coordonnées atomiques décrivant les phénomènes de relaxation élastique. Dans la référence [TOKAR A-2003a] nous avons proposé une solution à ce problème en effectuant une moyenne sur les coordonnées continues en utilisant l'approximation conventionnelle harmonique pour les interactions élastiques, ce qui projette le système sur un gaz de réseau avec uniquement des variables discrètes (les occupations atomiques et les coordonnées du réseau). Les systèmes de ce type sont particulièrement pratiques pour des simulations Monte Carlo. De plus nous avons

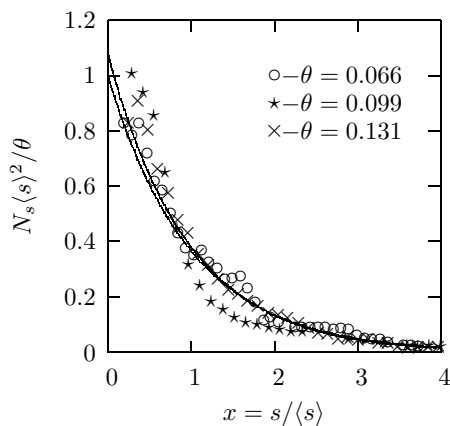


FIG. 1.42 – Distribution en taille renormalisée de fils de Ga sur Si(001) comparée aux valeurs expérimentales de Albao et al., *Phys. Rev. B* **72**, 035426 (2005) : taille finie (courbe pleine du dessus) ou asymptotique (courbe pleine en dessous) pour trois valeurs du recouvrement (la plus basse, la médiane et la plus haute des valeurs expérimentales de la référence sus-citée).

montré que la version 1D du modèle précédent admet une solution exacte. Ceci a deux intérêts. On peut tout d'abord étudier théoriquement de façon rigoureuse les conditions d'auto-assemblage et d'auto-organisation qui pourraient être adoptées dans des développements technologiques. Par exemple dans la référence [TOKAR A-2005] nous avons généralisé

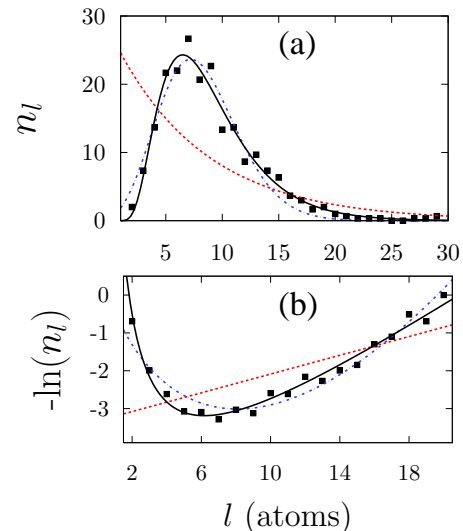


FIG. 1.43 – (a) Nombre de chaînes Ag de longueur auto-assemblées sur des marches d'une surface vicinale Pt(779) déterminé expérimentalement (carrés noirs) et ajustement de cette courbe (en pointillés) par Gambardella et al., *Phys. Rev. B* **73**, 245425 (2006), notre ajustement en considérant la répulsion coulombienne (traits long-pointillés) ou l'interaction dipole-dipole (courbe pleine). (b) Mêmes courbes en échelle logarithmique pour les longueurs d'intervalles des chaînes.

cette solution exacte au cas d'un substrat périodique. Il en ressort que tant à 1D qu'à 2D la modulation du substrat rend la distribution de taille des îlots auto-assemblés toujours plus étroite, donc meilleure pour des applications nanotechnologiques. Un autre exemple est l'utilisation d'un substrat présentant un potentiel aléatoire. L'analyse qui permet une solution exacte dans de tels cas peut être très utile en fournissant, pour le moins, des points de repère dans des mises en oeuvre technologiques.

La deuxième application de ces modèles 1D est la description de systèmes 1D observés expérimentalement. Avec l'aide de nos modèles, nous avons pu comprendre les comportements expérimentaux de nanofils : décroissance exponentielle des distribution de taille des chaînes 1D de Ga sur Si(001) [TOKAR A-2007, TOKAR A-2007a] et le comportement non monotone pour des chaînes d'Ag sur Pt (voir les figures 1.42 et 1.43). [TOKAR A-2005, TOKAR A-2006]