

## DESCRIPTION D'UN PROJET DE THÈSE FINANCÉ - ÉCOLE DOCTORALE « Matière, Molécules, Matériaux & Géosciences »

### ✚ INFORMATIONS GÉNÉRALES

<b>Titre de la thèse :</b> Modélisation multi-échelle du plasma en pulvérisation magnétron à impulsions de haute puissance (HiPIMS) pour le dépôt de films minces de titane
<b>Champ disciplinaire 1 :</b> Physico-chimie des plasmas <b>Champ disciplinaire 2 :</b> Sciences des Matériaux
<b>Trois mots-clés :</b> plasma, modélisation, dépôt
<b>Unité d'accueil (préciser si temps partagé entre plusieurs sites) :</b> Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel, IMN, Nantes Université
<b>Nom, prénom du directeur de thèse (HDR indispensable) :</b> Rhallabi Ahmed <b>Adresse mail :</b> ahmed.rhallabi@cnrs-imn.fr  <b>Nom, prénom du co-directeur (le cas échéant) (HDR indispensable) :</b> <b>Adresse mail :</b>  <b>Nom, prénom du co-encadrant de thèse 1 (le cas échéant) :</b> Ettouri Rim <b>Adresse mail :</b> rim.ettouri@cnrs-imn.fr  <b>Nom, prénom du co-encadrant de thèse 2 (le cas échéant) :</b> <b>Adresse mail :</b>
<b>Contact(s) (adresse postale) :</b> 2 rue de la Houssinière, BP32229, 44322 Nantes cedex 3, France

Une fois complété, merci d'enregistrer ce document au format pdf avec le nom suivant : Nom du Directeur thèse\_Unité.pdf

## ✚ DESCRIPTION SCIENTIFIQUE DU PROJET DE THÈSE

### Description du sujet : contexte, objectifs, méthodologie (1 page maximum)

#### Contexte

Ce projet de thèse s'articule autour de la **pulvérisation magnétron pulsée haute puissance (HiPIMS)**, un procédé de dépôt innovant et en pleine expansion pour la **croissance de films minces**. Ses applications potentielles sont nombreuses en raison de la conformité de dépôt, de la possibilité d'augmenter l'adhérence des films par une préparation des substrats *ad-hoc* et de diminuer la morphologie colonnaire en augmentant la taille des grains. Ce procédé permet en effet de dépasser les limitations des systèmes conventionnels en appliquant des impulsions de très haute puissance (plusieurs dizaines de kilowatts) pendant quelques micro-secondes, favorisant une ionisation accrue des espèces gazeuses en vue de produire des films plus denses/moins poreux et présentant des propriétés améliorées par rapport aux caractéristiques standards des couches minces : dépôt directionnel et donc amélioration de la conformité, apport d'énergie conduisant à la formation de phase cristalline sans la nécessité de chauffer le substrat (procédé basse température).

L'objectif de ce projet est d'élargir les horizons de la recherche sur la HiPIMS en se penchant de manière détaillée sur deux modes spécifiques : le régime **e-HiPIMS**, qui consiste à appliquer des impulsions de tension de formes complexes (créneaux complexes, escaliers) à la cible et/ou au porte substrat pour accélérer les espèces pulvérisées au moment opportun vers le substrat/le film en croissance, et le mode **R-HiPIMS**, qui ajuste la réactivité du plasma par l'introduction de gaz réactifs pour la synthèse de nitrures, oxynitrures et oxydes de métaux. Ces deux modes offrent la possibilité d'affiner le procédé de dépôt, ouvrant ainsi la voie à l'amélioration de la composition et de la structuration des films minces. À travers une démarche novatrice de **modélisation dynamique du plasma** et de **ses interactions avec la cible et le substrat**, ce travail de recherche ambitionne de jeter un nouveau regard sur les principes physiques qui régissent la pulvérisation cathodique réactive HiPIMS.

Ce projet profite également d'un **environnement collaboratif** stimulant, fort de la synergie entre diverses équipes de recherche à la fine pointe dans le domaine des matériaux et des procédés de dépôt. En s'inscrivant dans le prolongement des travaux précédemment menés au sein de l'équipe *Plasma et Couches Minces* et par le biais de collaborations internationales, cette thèse vise à montrer comment une compréhension approfondie des interactions impliquées peut conduire à l'élaboration de films minces dotés de propriétés remarquables, répondant ainsi aux enjeux technologiques et environnementaux d'aujourd'hui et de demain.

#### Objectifs

À la pointe de l'avancement en sciences des matériaux, l'importance de la modélisation est indéniable. Elle se révèle comme un outil crucial, ouvrant la voie à des percées dans le domaine des dépôts de couches minces. Ce projet de doctorat vise à développer des techniques de simulation avancées pour :

- ✚ Approfondir notre compréhension des nouveaux modes HiPIMS : e-HiPIMS et R-HiPIMS,
- ✚ Affiner la morphologie et la composition des films à base de Ti selon des exigences spécifiques,
- ✚ Soutenir les projets expérimentaux en cours dédiés aux dépôts :
  - ✚ par e-HiPIMS de Ti comme revêtements anti-corrosion
  - ✚ par R- HiPIMS de TiN comme électrodes pour MOTronique et supercapacitors
  - ✚ par R- HiPIMS de TiOx comme capteurs

#### Méthodologie

La stratégie adoptée pour ce projet de thèse se déploie en plusieurs phases, chacune visant à approfondir et à perfectionner notre compréhension et notre capacité à modéliser les processus impliqués dans le dépôt de titane via la technique HiPIMS dans un plasma d'argon. Le parcours méthodologique se décline comme suit :

- ✚ Améliorer et étendre un modèle global dynamique, en exploitant la modulation d'impulsions multi-niveaux (**e-HiPIMS**) pour introduire des complexités / des degrés de liberté supplémentaires dans le contrôle du procédé.
- ✚ Intégrer les aspects d'énergie cinétique des électrons énergétiques accélérés à travers la gaine, offrant une représentation plus précise des phénomènes d'ionisation dans le plasma.
- ✚ Incorporer la réactivité chimique des espèces plasma en présence d'azote (N<sub>2</sub>) et d'oxygène (O<sub>2</sub>), essentielle pour le régime **R-HiPIMS**, pour le dépôt d'oxyde/nitride de titane.
- ✚ Finalement, coupler le modèle global raffiné au modèle *Particle-In-Cell-Monte-Carlo* (PIC-MC) pour une simulation complète du transport des ions dans la phase post-décharge, visant à décrypter les mécanismes sous-jacents du procédé HiPIMS.

**Compétences scientifiques et techniques requises pour le candidat :**

- ✚ Connaissances en physico-chimie des plasmas & interactions plasma/surface
- ✚ Expérience en dépôt et/ou caractérisation de films minces
- ✚ Appétence pour la modélisation et simulation numérique
- ✚ Intérêt pour la recherche multidisciplinaire et curiosité scientifique
- ✚ Capacité à collaborer efficacement en équipe pour mener à bien le projet de recherche

**✚ ENCADREMENT DE LA THÈSE<sup>1</sup>**

<b>Nom de l'unité d'accueil :</b> Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel	<b>Nom de l'équipe d'accueil :</b> Plasmas et Couches Minces (PCM)
<b>Nom du directeur de l'unité :</b> Florent Boucher	<b>Nom du responsable de l'équipe :</b> Mireille Richard-Plouet
<b>Coordonnées du directeur de l'unité :</b> tél : 02 40 37 39 24 mail: Florent.Boucher@cnrs-imn.fr	<b>Coordonnées du responsable de l'équipe :</b> tél : 02 40 37 39 56 mail: Mireille.Richard@cnrs-imn.fr
<b>Directeur de thèse</b> <b>Nom, prénom :</b> Rhallabi Ahmed <b>Fonction :</b> Professeur des Universités <b>Date d'obtention de l'HDR :</b> Novembre 2001 <b>Employeur :</b> Nantes Université <b>Taux d'encadrement doctoral dans le présent sujet :</b> 40 % <b>Taux d'encadrement doctoral en cours (directions et co-directions) :</b> 90 % <b>Nombre de directions/co-directions de thèse en cours :</b> 2	
<b>Co-directeur (le cas échéant)</b> <b>Nom, Prénom :</b> <b>Fonction :</b> <b>Date de l'obtention de l'HDR :</b> <b>Employeur :</b>	

<sup>1</sup> Dans l'ED 3MG, si 1 scientifique dans la direction de la thèse = 100% d'encadrement doctoral ; si 2/3 personnes impliquées dans l'encadrement de la thèse, un taux de 40% minimum est exigé pour l'HDR directeur et 30% pour les autres encadrants.

<p>École doctorale de rattachement :</p> <p>Taux d'encadrement doctoral dans le présent projet :</p> <p>Taux d'encadrement doctoral en cours (directions/co-directions/co-encadrements):</p> <p>Nombre de directions/co-directions/co-encadrements de thèse en cours :</p>
<p><b>Co-encadrant de thèse 1 (le cas échéant)</b></p> <p>Nom, prénom : <b>Ettouri Rim</b></p> <p>Fonction : Enseignante-chercheure (MCF)</p> <p>Titulaire de l'HDR : <input type="checkbox"/>oui <input checked="" type="checkbox"/>non Si oui, date d'obtention de l'HDR :</p> <p>Employeur : <b>Nantes Université</b></p> <p>École doctorale de rattachement :</p> <p>Taux d'encadrement doctoral dans le présent projet : <b>60 %</b></p> <p>Taux d'encadrement doctoral en cours (directions/co-directions/co-encadrements) : 0</p> <p>Nombre de directions/co-directions/co-encadrements de thèse en cours : 0</p>
<p><b>Co-encadrant de thèse 2 (le cas échéant)</b></p> <p>Nom, prénom :</p> <p>Fonction :</p> <p>Titulaire de l'HDR : <input type="checkbox"/>oui <input type="checkbox"/>non Si oui, date d'obtention de l'HDR :</p> <p>Employeur :</p> <p>École doctorale de rattachement :</p> <p>Taux d'encadrement doctoral dans le présent projet :</p> <p>Taux d'encadrement doctoral en cours (directions/co-directions/co-encadrements) :</p> <p>Nombre de directions/co-directions/co-encadrements de thèse en cours :</p>
<p><b>Partenaire privé (si financement CIFRE, privé...)</b></p> <p>Nom, prénom :</p> <p>Fonction :</p> <p>Entreprise :</p> <p>Taux d'encadrement doctoral dans le présent projet :</p> <p>Taux d'encadrement doctoral en cours (directions/co-directions/co-encadrements) :</p> <p>Nombre de directions/co-directions/co-encadrements de thèse en cours :</p>
<p><b>Partenaire international (si thèse en co-tutelle)</b></p> <p>Nom, prénom :</p> <p>Fonction :</p> <p>Employeur :</p> <p>Taux d'encadrement doctoral dans le présent projet :</p> <p>Taux d'encadrement doctoral en cours (directions/co-directions/co-encadrements) : Nombre de directions/co-directions/co-encadrements de thèse en cours :</p>

## FINANCEMENT DE LA THÈSE

<b>Origine(s) du financement de la thèse :</b> Contrat Doctoral Etablissement de Nantes Université
<b>Montant brut mensuel :</b> environ 2000 € brut par mois
<b>État du financement de la thèse :</b> acquis
<b>Date du début/durée du financement de la thèse :</b> automne 2024 / 36 mois NU