

Mercredi 6 Février 2019 à 10h30

Salle de réunion du SRMP – Bâtiment 520 - Pièce 109

Étude de la formation d'agrégats de défauts ponctuels et d'impuretés de lithium dans le silicium cristallin par méthode Monte Carlo cinétique.

Mickaël TROCHET

DEN/DMN-Service de Recherches de Métallurgie Physique, CEA, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

Les performances des cellules photovoltaïques, des transistors et des batteries sont entre autres fortement affectées par la présence et l'agrégation des défauts intrinsèques et des impuretés dans le silicium ou ses alliages.

L'étude de la stabilité thermodynamique, de la stabilité cinétique et de la diffusion de ces défauts permet de mieux comprendre certains phénomènes tels que le bruit télégraphique observé dans les semi-conducteurs fortement endommagés et l'amorphisation rapide de l'anode de c-Si lors de la première lithiation d'une batterie.

La technique d'activation et de relaxation cinétique (kART ou ARTc) est utilisée pour l'étude de matériaux variés et est couplée aux potentiels de Stillinger-Weber et ReaxFF. ARTc est une méthode de Monte-Carlo cinétique pouvant traiter les systèmes hors-réseau en construisant à la volée un catalogue des transitions accessibles tout en capturant les effets élastiques à longue portée. Cet algorithme explore le paysage énergétique de manière approfondie et permet de caractériser la stabilité aussi bien thermodynamique que cinétique des différentes configurations.

Ainsi à l'aide de ARTc, nous sommes capables d'identifier les différents mécanismes de diffusion des défauts ponctuels et des impuretés de lithium isolés ou agrégés dans le silicium cristallin. En effet, un des exemples qui sera introduit est le complexe formé d'un amas deux interstitiels qui présente un comportement super-diffusif pseudo-1D dans les directions $\langle 110 \rangle$ du cristal de silicium.

Nous décrirons, dans cette présentation exposant mes travaux de thèse, la méthode ARTc ainsi que ses avantages et ses limites, puis nous passerons en revue les résultats, en ciblant plus particulièrement les défauts intrinsèques et les impuretés de lithium dans le silicium. Nous montrerons que la cinétique de diffusion des amas de défauts est très riche et complexe, malgré la simplicité apparente des systèmes étudiés.

Mots clés : Silicium, Défauts ponctuels, Impuretés de lithium, Mécanismes de diffusion, Monte-Carlo cinétique.



Les visiteurs de nationalité étrangère hors Union Européenne sont priés de bien vouloir avertir impérativement

3 semaines à l'avance, et ceux de l'Union Européenne 1 ou 2 jours avant le séminaire, le Secrétariat du Service de leur entrée sur le Centre : Tel : 01 69 08 66 64 - Fax : 01 69 08 68 67.

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
DEN/DANS/DMN Service de Recherches de Métallurgie Physique
Centre de Saclay – Bât. 520 - 91191 Gif-sur-Yvette Cedex – France