

THESE DE DOCTORAT

NANTES UNIVERSITE

ECOLE DOCTORALE N° 596

Matière, Molécules, Matériaux et Géosciences

Spécialité : *Physique*

Par

Tojo RASOANARIVO

Modélisation multi-échelle de la gravure par couche atomique du GaN en plasmas chlorés

Thèse présentée et soutenue à Nantes, le Mercredi 8 Avril 2026

Unité de recherche :

Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel (IMN) – UMR 6502

2 rue de la Houssinière, BP 32229

44322 Nantes Cedex 3, France

Rapporteurs avant soutenance :

Armelle MICHAU
Christophe VALLEE

Ingénieure de Recherche – Sorbonne Université - *LSPM, UMR CNRS 8001*
Full Professor – *University at Albany, USA*

Composition du Jury :

Président : Prénom Nom

Examineurs : **Rémi DUSSART**

Anne TALNEAU

Grégory MARCOS

Cédric MANNEQUIN

Isabelle BRAEMS

Dir. de thèse : **Ahmed RHALLABI**

(à préciser après la soutenance)

Professeur des Universités – Université d'Orléans - *GREMI, UMR CNRS 7344*

Directrice de Recherche – *C2N, UMR CNRS 9001*

Ingénieur de Recherche – Université de Lorraine - *IJL, UMR CNRS 7198*

Chargé de Recherche – *IMN, UMR CNRS 6502*

Chargée de Recherche – *IMN, UMR CNRS 6502*

Professeur des Universités – *Nantes Université - IMN – UMR CNRS 6502*

Invité(s)

Mohamed BOUFNICHEL
Fabrice ROQUETA

Docteur Ingénieur, *STMicroelectronics Tours*

Docteur Ingénieur, *STMicroelectronics Tours*

Titre : Modélisation multi-échelle de la gravure par couche atomique du GaN en plasmas chlorés

Mots clés : semi-conducteur, procédé plasma, gravure, modélisation, multi-échelle

Résumé : Le nitrure de gallium (GaN) est un matériau clé pour les dispositifs de puissance et RF dont la miniaturisation des architectures rend le contrôle nanométrique de la gravure plasma critique. Les procédés de gravure continus en chimie chlorée (Cl_2/Ar), largement utilisés, offrent des vitesses élevées mais induisent d'importants défauts dans le matériau, impactant les performances et la fiabilité. La gravure par couche atomique (ALE), procédé cyclique alternant modification chimique de surface et retrait par bombardement ionique de faible énergie, vise au contraire à retirer la matière couche par couche en limitant ces dommages. Le projet de cette thèse est le développement d'un modèle multi-échelle prédictif de l'ALE du GaN en plasmas Cl_2/Ar . Le simulateur couple un modèle global dynamique du plasma, un modèle de gaine Monte-Carlo fournissant les distributions en énergie et en angle des ions au substrat, et un modèle de surface cinétique Monte-Carlo décrivant l'adsorption du chlore, la modification de la couche superficielle et son enlèvement sélectif. Le modèle de surface est alimenté par une étude *ab initio* (DFT) de l'interaction Cl/GaN . L'ensemble du simulateur permet d'identifier des fenêtres d'énergie des ions compatibles avec un régime ALE auto-limitant, de relier les conditions plasma aux flux et distributions en énergie des ions, et de prédire l'épaisseur gravée par cycle ainsi que l'évolution de l'état de surface au cours des cycles. A terme, ce travail peut être implémenté dans un contexte "digital twin" de procédés ALE du GaN, destiné à guider l'optimisation et l'industrialisation de la gravure à l'échelle atomique.

Title : Multiscale modelling of Atomic Layer Etching of GaN in chlorinated plasmas

Keywords : semiconductor, plasma process, etching, modelling, multiscale

Abstract : Gallium nitride (GaN) has emerged as a key material for next-generation power and RF electronics, where device scaling makes nanometre-level control of plasma etching a critical issue. Conventional continuous etching in chlorinated plasmas (typically Cl_2/Ar), widely used in industrial GaN processing, enables high etch rates but also generates substantial damage in the near-surface region, with detrimental impact on device performance and reliability. Atomic Layer Etching (ALE), a cyclic process that alternates a chemical surface modification step with a low-energy ion bombardment step, is designed to remove material layer by layer while reducing such damage. In this thesis, a predictive multiscale model of GaN ALE in Cl_2/Ar plasmas is developed. The simulator combines a time-dependent global plasma model, a Monte-Carlo sheath model that computes ion energy and angular distributions at the substrate, and a kinetic Monte Carlo surface model that describes chlorine adsorption, modification of the topmost GaN layers, and their selective removal under ion impact. The surface model is parameterised and constrained by an *ab initio* (DFT) study of the Cl/GaN interaction. The resulting framework makes it possible to identify ion-energy windows compatible with a genuinely self-limiting ALE regime, to connect plasma operating conditions to ion fluxes and energy distributions, and to predict both the etched thickness per cycle and the evolution of the surface state over multiple cycles. In the longer term, this work provides a solid basis for a "digital twin" of GaN ALE processes, aimed at supporting the optimisation and industrial deployment of atomic-scale etching.