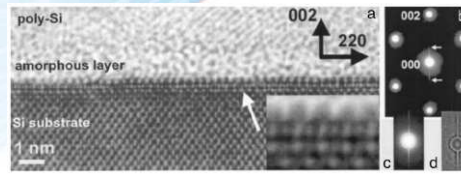


Dr. Pascal Pochet
Laboratoire de simulation atomistique
Prof. Mehdi Djafari-Rouhani
Laboratoire d'Analyse et d'Architecture des Systèmes
Dr. Guy Tréglià
Centre de Recherche en Matière Condensée et Nanosciences
Dr. Philippe Blaise
Laboratoire de Simulation et Caractérisation des Procédés
Dr. Hervé Jaouen
STM-Crolles modeling department à STMicroelectronics

Objectif : Simulations atomistiques pour aider à la compréhension et à la maîtrise de procédés complexes impliquant des phénomènes d'oxydation et de diffusion dans SiGe.

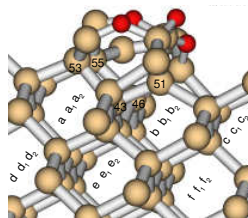


P. Donnadieu et al. APL 2004

Pôle oxydation

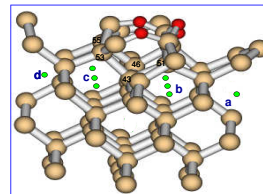
Modélisation *ab initio* de l'oxydation de SiGe

Création de lacunes et d'interstitiels pour comprendre les origines de la génération d'interstitiels lors de l'oxydation. Ces résultats doivent permettre de paramétrer un logiciel de Monte Carlo Cinétique pour simuler le processus d'oxydation à l'échelle du procédé technologique.



a, a₂, ..., f_z sont des positions interstitielles

Atome No	E _{int} (eV)
55	6.68
46	6.50
53	6.05
43	5.94
51	5.86



Atome No	E _{int} (eV)	a	b ₁	b ₂	b ₃	c ₁	c ₂	c ₃	d
51	5.85	2.62	2.07	0.00	2.82	3.34	0.00	3.13	2.74
43	5.94	2.61	3.38	0.00	2.72	2.49	0.00	3.30	2.30
53	6.05	2.14	2.08	0.99	2.60	2.88	3.23	2.75	

Pour 51, 43 and 53, 8 positions interstitielles ont été testées

E = 0 eV correspond au cas où l'interstitiel revient sur la position initiale

--> retour direct 51(b2), 43(b2,c2)

--> retour par mouvement collectif 51(c2), 53(b2)

Interstitiel instable 53(b3, c2)

Pôle contraintes

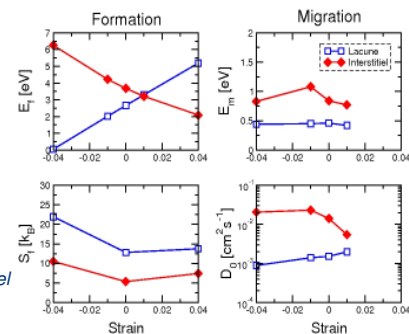
Modélisation des contraintes générées à l'interface Si(Ge)/SiO

Elaboration d'un protocole de calcul des mécanismes de formation et migration des défauts dans Si et Ge, dans le cadre du potentiel de Stillinger-Weber. Les parties "formation" et "mobilité" du coefficient de diffusion sont calculées en alternant calculs d'énergie et d'entropie à 0K et calculs de dynamique moléculaire (barrière, préfacteur).

Cartographie de l'influence d'une contrainte isotrope sur les défauts de volume de Si (cf. figure) et Ge :

- La formation d'interstitiels favorisée en dilatation, celle des lacunes en compression
- La migration des interstitiels est favorisée en dilatation, barrière toujours abaissée pour la lacune
- L'entropie de formation est toujours augmentée par la contrainte
- Le préfacteur augmente avec la dilatation pour la lacune et passe par un maximum pour l'interstitiel

$$D(T) = \exp(-E_f TS_f / k_B T) \times D_0 \exp(-E_m / k_B T)$$

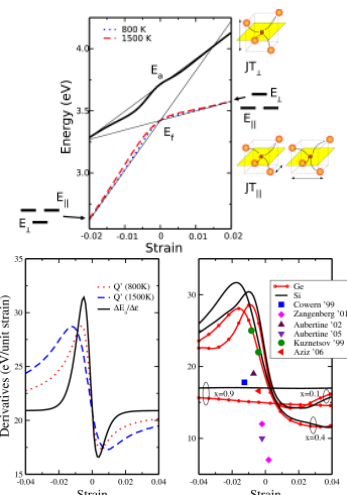


Pôle diffusion

Modélisation multi-échelle de la diffusion dans SiGe

La construction de la base de donnée *ab initio* (~ 250 config.) concernant la diffusion lacunaire dans SiGe a été réalisée en tenant compte de l'effet Jahn-Teller avec le code SIESTA. Un modèle simplifié des énergies de formation (E_f) et d'activation de la migration (E_a) ainsi que les volumes de relaxation associés en fonction de la concentration de Ge et de la contrainte nous a permis d'étudier la diffusion lacunaire dans SiGe sous une contrainte bi-axiale par simulation de Monte Carlo. Ceci nous a permis de mettre en évidence de nouvelles propriétés sur l'accélération de la diffusion lacunaire sous contrainte

- évolution en fonction de la température
- comportement en tension ou en compression non symétrique
- dépendance complexe et non-linéaire en fonction de la contrainte elle-même.



Contact : Pascal Pochet / Laboratoire de Simulation atomistique - Fax : 04 38 78 51 97 - Pascal.Pochet@cea.fr