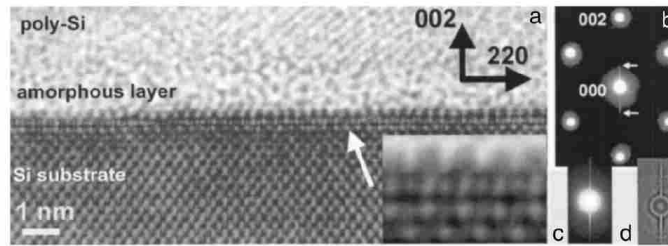


Objectif : Simulations atomistiques pour aider à la compréhension et à la maîtrise de procédés complexes impliquant des phénomènes d'oxydation et de diffusion dans les alliages SiGe.

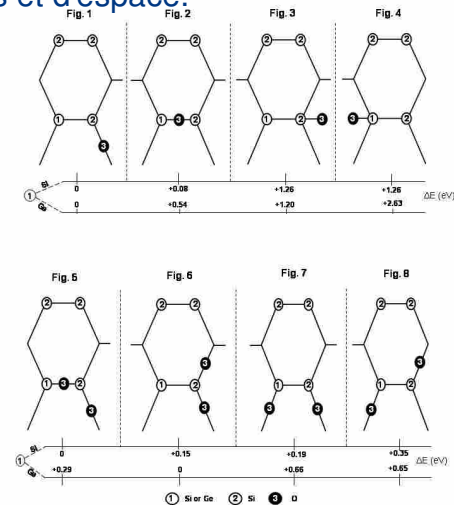
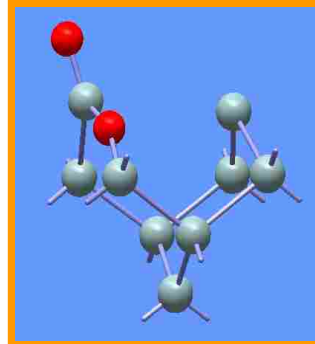
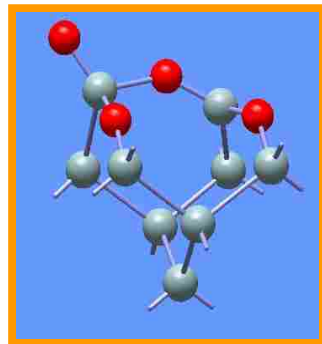


P. Donnadiou et al. APL 2004

Pôle oxydation

Modélisation *ab initio* de l'oxydation de SiGe.

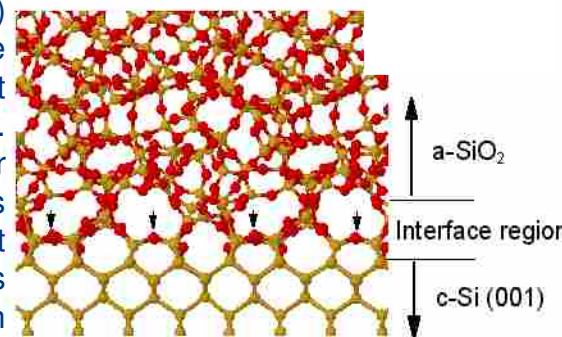
Le calcul *ab initio* permet l'identification de différents mécanismes élémentaires : l'adsorption puis l'incorporation d'une (gauche) ou de deux (centre) molécules d'oxygène. La sélectivité chimique du germanium par rapport au silicium est calculée pour les deux premiers atomes d'oxygène (droite) : l'oxydation de Si est nettement favorisée. Ces informations seront utilisées dans un code de Monte Carlo pour étudier l'oxydation sur une plus grande échelle de temps et d'espace.



Pôle contraintes

Modélisation des contraintes générées à l'interface Si(Ge)/SiO₂

L'avancement du front d'oxydation génère à l'interface avec la couche de Si(Ge) trois types de perturbations: un champ de contraintes, un gradient de concentration et la production de défauts. Ces trois phénomènes sont interdépendants et intimement liés aux mécanismes atomistiques de l'oxydation. La tâche de ce pôle sera d'analyser et comprendre cette interdépendance, par l'identification et la quantification des mécanismes élémentaires mis en jeu dans l'homogénéisation du gradient de concentration, la relaxation des contraintes et la dynamique des défauts à l'interface. Nous utiliserons pour ce faire des simulation atomistiques (Dynamique Moléculaire essentiellement) dans un potentiel d'interaction semi-empirique que nous validons actuellement par le calcul des références nécessaires dans le volume de l'alliage SiGe.



Pôle diffusion

Modélisation multi-échelle de la diffusion dans SiGe

Les phénomènes de diffusion chimique sont étudiés à l'échelle atomique. Le calcul *ab initio* permet l'identification des différents mécanismes élémentaire : interstitiels (gauche) ou lacunaires (centre gauche). L'utilisation de ces informations dans un code de Monte Carlo (centre droite) nous a permis de découvrir l'existence de plusieurs régimes de diffusion lacunaire dans le silicium (droite). Le rôle des contraintes et du flux de défauts induits par l'oxydation sera introduit pour étudier des phénomènes où la diffusion est accélérée ou retardée par l'oxydation (respectivement OED et ORD en anglais).

