

Patrick Ganster\*, Guy Tréglia\*\*, Andrés Saúl\*\* et Normand Mousseau\*\*\*

\* Ecole des Mines des Saint-Etienne, centre SMS, 158 cours Fauriel, 42023 Saint-Etienne cedex 2

\*\* Centre Interdisciplinaire de Nanoscience de Marseille, CNRS, Campus de Luminy, Case 913, 13288 Marseille Cedex 9, France

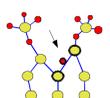
\*\*\* Département de physique, Université de Montréal, C.P. 6128, Montréal (Québec) Canada H3C 3J7

**Résumé :** utilisant la dynamique moléculaire (DM) et le potentiel de Watanabe (de type Stillinger-Weber) pour décrire Si/SiO<sub>2</sub>, voici quelques résultats obtenus au cours de l'ANR OSiGe. Ces résultats concernent l'étude des contraintes et de la diffusion de Si au cours de l'oxydation de Si, l'adaptation du modèle pour décrire l'oxydation de SiGe et enfin un exemple d'utilisation de la méthode ART pour décrire les premiers stades d'oxydation de Si.

## Oxydation de Si

### Modèle :

La croissance de l'oxyde est modélisée en ajoutant les atomes d'oxygène (atome par atome) suivant ces deux étapes au niveau de l'interface :

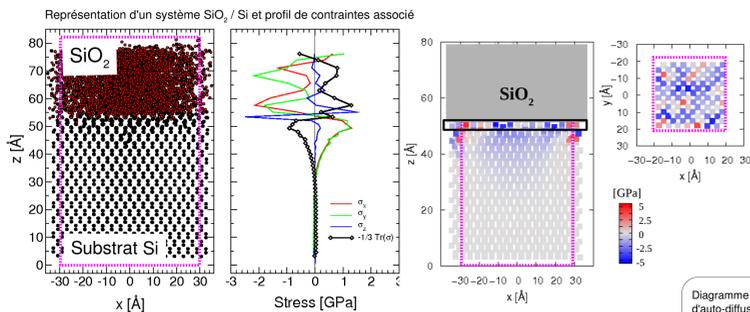


introduction d'un atome d'oxygène sur une liaison Si-Si à partir du Si le plus haut sur la structure

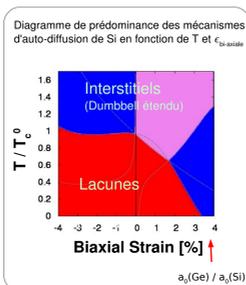


relaxation du système par DM à 1200K durant 1 ps

### Analyse des contraintes

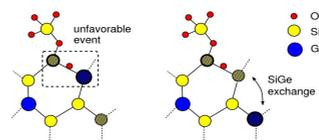


Sous l'oxyde en compression, le substrat de Si, globalement en tension, présente un champ de contraintes très inhomogène avec des zones en tension et en compression. Dans ce champ de contraintes, la diffusion est dominée par des mécanismes lacunaires dans les zones en compression et interstitiels dans les zones en tension.



## Oxydation de SiGe

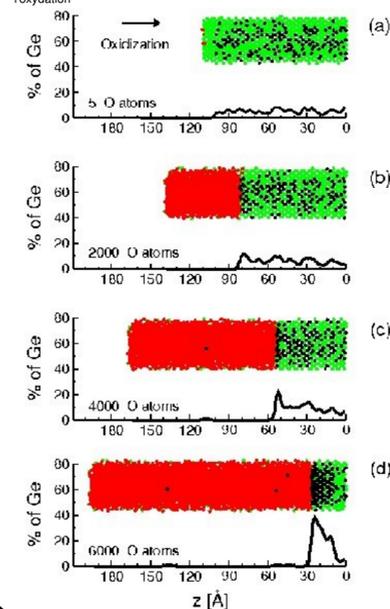
### Modèle :



Pour modéliser l'oxydation préférentielle de Si par rapport à Ge ( $\Delta E_f^{SiO_2} < \Delta E_f^{GeO_2}$ ), des échanges SiGe sont réalisés. Les échanges les plus favorables énergétiquement sont retenus.

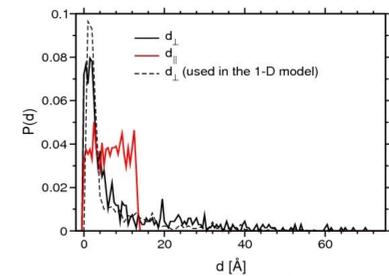
### "condensation de Ge"

Evolution de la concentration de Ge dans le substrat au cours de l'oxydation



Au cours de l'oxydation, le substrat SiGe s'appauvrit peu à peu en Si pour s'enrichir en Ge. Les échanges entre Si et Ge sont corrélés au champ de contraintes au voisinage de l'oxyde.

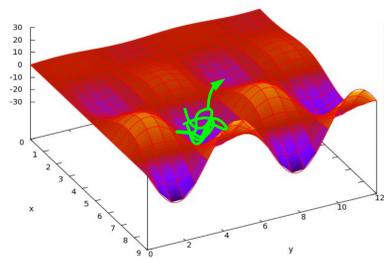
Distribution des distances entre Si et Ge échangés (distances // et ⊥ à l'interface)



La distribution des distances d'échange montre que les échanges entre Si et Ge dépendent des hétérogénéités de contraintes (composante parallèle à l'interface) et de la contrainte globale (composante parallèle à la surface)

## Apport de la méthode ART

ART : Activation, Relaxation Technique (N. Mousseau)



Méthode qui permet d'explorer la surface d'énergie potentiel d'un système pour l'étude des minima locaux et des barrières énergétiques associées à des événements

Un événement ART correspond à sortir d'un bassin harmonique (Activation) puis de faire converger le système vers un point col (Relaxation) et enfin à rejoindre un nouveau bassin harmonique.

Un événement est réalisé sur un ensemble d'atomes ou le système entier.

L'algorithme et les codes sources sont disponibles à l'adresse suivant : <http://www.phys.umontreal.ca/~mousseau>

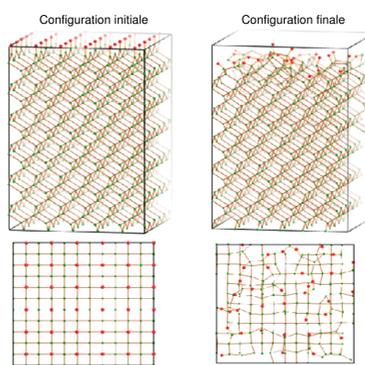
### Bibliographie:

- T. Watanabe, H. Fujiwara, H. Noguchi, T. Hoshino, I. Ohdomari, Jpn. J. Appl. Phys. 38 (1999) L366
- P. Ganster, G. Tréglia, A. Saúl, F. Lançon and P. Pochet, Thin Solid Films 518 9 2422-2426 (2010).
- P. Ganster, G. Tréglia, A. Saúl, Phys. Rev. B 81, 045315 (2010)
- P. Ganster, G. Tréglia, A. Saúl, Phys. Rev. B 79, 115205 (2009).

à venir ; From molecular dynamics simulation to one-dimensional model of the Ge condensation technique, P. Ganster, G. Tréglia, A. Saúl, First stages of silicon oxidation with the Activation Relaxation Technique (ART), P. Ganster and N. Mousseau,

## Premiers Stades de formation de SiO<sub>2</sub> sur Si

Configuration avant et après réalisation de 4456 événements ART



Configuration initiale :

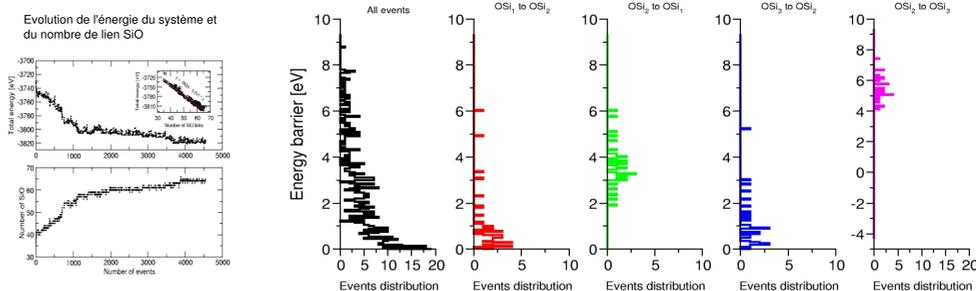
36 atomes d'oxygène sur un substrat de silicium

Evenement ART défini:

déplacement d'un atome d'oxygène et ses premiers voisins

Après 4556 événements ART réalisés, le système est à l'équilibre et les atomes d'oxygène restent en surface pour former un oxyde SiO<sub>2</sub>.

Distribution des barrières énergétiques associées à la formation de l'oxyde SiO<sub>2</sub>



Les barrières énergétiques associées aux événements permettent de discerner les événements les plus favorables des moins favorables.