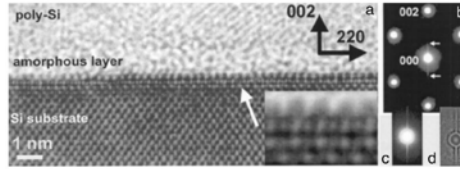


Objectif : Simulations atomistiques pour aider à la compréhension et à la maîtrise de procédés complexes impliquant des phénomènes d'oxydation et de diffusion dans SiGe.



P. Donnadieu et al. APL 2004

Dr. Pascal Pochet

Laboratoire de simulation atomistique

Prof. Mehdi Djafari-Rouhani

Laboratoire d'Analyse et d'Architecture des Systèmes

Dr. Guy Tréglia

Centre de Recherche en Matière Condensée et Nanosciences

Dr. Philippe Blaise

Laboratoire de Simulation et Caractérisation des Procédés

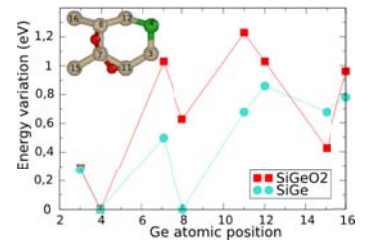
Dr. Hervé Jaouen

STM-Crolles modeling department à STMicroelectronics

Pôle oxydation

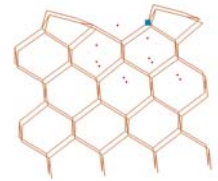
Modélisation *ab initio* de l'oxydation de SiGe

Les états les plus stables : Ge en positions (4) ou (8) sans O, Ge en (8) avec O, sont pris comme référence. Avec Ge en (7), (8) et (11), l'augmentation d'énergie est nettement plus importante (>0,5 eV) en présence d'oxygène. Ces positions sont 1^{er} voisines d'oxygène, Avec Ge en (12) et (16), 2nd voisines d'oxygène, la différence est plus faible.



Création de paires de Frenkel

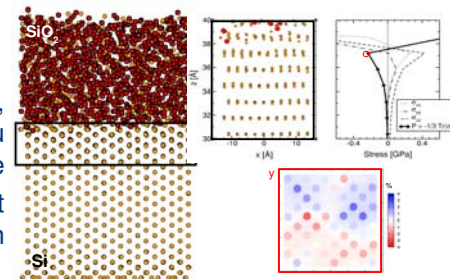
Les paires de Frenkel sont stabilisées par la présence d'atomes d'oxygène dans leur voisinage : de 1 à 3 eV en fonction du nombre d'atomes d'oxygène et de la distance oxygène-interstitiel.



Pôle contraintes

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

A partir d'un modèle d'oxydation de Si par dynamique moléculaire, nous rendons compte des contraintes et des déformations générées au voisinage d'un interface réaliste SiO₂/Si. Les premiers plans de silicium présentent des microstructures en forte tension qui voisinent avec des microstructures en plus faible compression, conduisant à un profil en tension qui s'amortit dans le substrat.

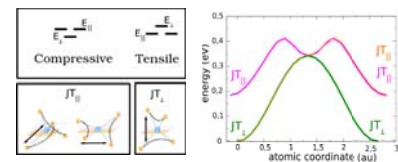
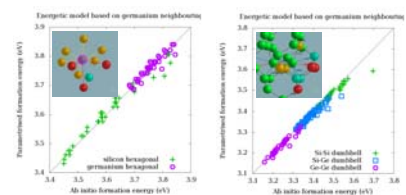


Carte de déformation dans le plan en tension

Pôle diffusion

Modélisation multi-échelle de la diffusion dans SiGe

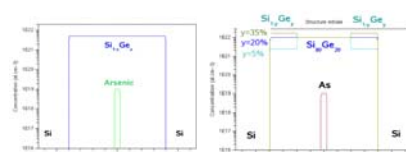
Un modèle simplifié nous permet de reproduire les énergies de formation des interstitiels dissociés et hexagonaux en fonction de la concentration de Ge dans les trois couches autour du défaut. Une analyse du paramètre Q' qui décrit l'accélération de la diffusion sous contrainte a permis de mettre en évidence une dépendance en température qui explique la disparité des résultats expérimentaux. Une dissymétrie de comportement entre tension et compression est aussi révélée cet effet semble liée à l'effet Jahn-Teller sur la lacune qui induit un mécanisme de diffusion différent en tension et en compression.



Pôle intégration

Prise en compte des modèles atomistiques en TCAD

L'intégration d'un modèle atomistique dans la simulation TCAD est réalisée grâce à la paramétrisation du Q' (cf. Pôle Diffusion), dans le logiciel SPROCESS/SYNOPSIS de simulation des procédés. Une série de calculs sur l'influence du Q' sur la diffusion lacunaire de l'arsenic As dans un profil contraint de Si_xGe_{1-x} est en cours d'analyse.



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