

MÉMOIRE

Présenté à l'Université des Sciences et Technologies de Lille

pour obtenir

L'HABILITATION à DIRIGER des RECHERCHES

par

Evelyne LAMPIN
née MARTIN

« Simulation de la formation des jonctions
ultra-minces : du continu à l'atomistique »

Soutenu le 13 décembre 2007 devant la commission d'examen :

Alain CAPPY	IEMN - Villeneuve d'Ascq	Président
Emmanuel DUBOIS	IEMN - Villeneuve d'Ascq	Directeur des recherches
Alain CLAVERIE	CEMES - Toulouse	Rapporteur
Yves LIMOGE	CEA - Saclay	Rapporteur
Daniel MATHIOT	InESS - Strasbourg	Rapporteur
Fabrizio CLERI	IEMN - Villeneuve d'Ascq	Examineur
Ray DUFFY	NXP - Leuven	Examineur
Peter PICHLER	Fraunhofer IISb - Erlangen	Examineur

*A Thomas et Emma,
à Jean-François.*

Remerciements

Ces travaux ont été réalisés à l'*Institut d'Electronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie* (UMR CNRS 8520) dans le groupe Microélectronique Silicium dirigé par Monsieur Andreas KAISER à mon arrivée puis par Monsieur Emmanuel DUBOIS. Je les remercie de m'y avoir accueillie.

Je remercie Monsieur Alain CAPPY pour avoir accepté la présidence du jury de cette habilitation.

Je remercie Messieurs Alain CLAVERIE, Daniel MATHIOT et Yves LIMOGE pour avoir accepté de rapporter ce travail.

Je remercie Messieurs Fabrizio CLERI, Ray DUFFY et Peter PICHLER pour avoir accepté de participer au jury en tant qu'examineurs.

Je remercie Monsieur Michel LANNOO, mon directeur de thèse, pour m'avoir orienté vers l'équipe Microélectronique Silicium.

Je remercie beaucoup Christophe KRZEMINSKI. L'activité de simulation de la recristallisation du silicium est autant la mienne que la sienne: je fais la dynamique moléculaire, il fait les empilements initiaux et extrait la vitesse de recristallisation. Nous sommes donc autant impliqués l'un que l'autre dans le sujet, ce qui permet des discussions très intéressantes et constructives. En congé maternité puis maman d'un petit bébé, j'ai par ailleurs pu apprécier à plusieurs reprises la serviabilité de Christophe, qui m'a représenté et a fait certains déplacements à ma place... et s'occupe des aspects administratifs et financiers de notre activité. Merci aussi pour la (double) relecture du manuscrit.

Je remercie également Jean-Michel DROULEZ. Durant toutes ces années où mon outil de travail a été la station de travail SUN, de la station de bureau au récent ordinateur octo processeur dual core SUNFire X4600, la collaboration avec Jean-Michel m'a permis d'améliorer ma connaissance de l'outil informatique et de l'utiliser comme tel, sans souci de son installation, maintenance, compatibilité.

Je remercie Catherine PRIESTER pour la relecture du manuscrit.

Je remercie toutes les personnes que j'ai cotoyées et que je cotoie dans l'équipe, et avec lesquelles j'ai passé une bonne partie de ces années : Tahsin AKALIN, Xavier BAIE, Nicolas BREIL, Quentin BRULIN, Jean-Luc BUBBENDORF, Valérie CUNY, Guillaume DE CREMOUX, Frédérique FRULEUX, Jérôme HERBAUX, Thomas HOFFMANN, Miguel HERNANDEZ, Guilhem LARRIEU, Emmanuel LECAT, Aurélie LECESTRE, Amanda MÜLLER, Julien PENAUD, Vincent SENEZ, Valérie VANDENHENDE, Dmitri YAREKHA et d'autres encore.

Enfin, je voudrais remercier l'un de mes collègues de l'IEMN, Jean-François LAMPIN, qui a écouté pendant toutes ces années mes histoires de diffusion, de défauts étendus, de dynamique moléculaire, et m'a souvent aidé grâce à son intérêt dès qu'il s'agit de sciences et à sa grande culture dans le domaine. Merci aussi pour la relecture du manuscrit.

Table des matières

Introduction	9
Chap. I Simulations continues des défauts étendus	11
1 Les défauts étendus et la diffusion transitoire accélérée du bore	11
2 Modèle “thermodynamique” des boucles de dislocation	15
3 Modèle de croissance atome par atome des défauts étendus	20
3.1 Présentation du modèle	20
3.2 Couplage avec les équations de diffusion à 1D	22
3.3 Optimisation de la résolution en approximation stationnaire	25
3.4 Raffinement de la description de la transition {113}-boucles	27
4 Conclusion	31
Chap. II Simulations atomistiques pour les jonctions ultra-minces	33
1 Introduction	33
2 Méthode de simulation	34
2.1 Les équations du mouvement	34
2.2 Potentiels interatomiques empiriques	37
2.3 Gestion des voisins et parallélisation	39
3 Première application : la diffusion du bore	42
4 Seconde application : la recristallisation du silicium	46
5 Conclusion	52
Conclusion et perspectives	55
Annexe I Curriculum vitae	67
Annexe II Activités autour de la recherche et l’enseignement	71
1 Enseignement	71
2 Encadrement	72
3 Activités contractuelles	72
4 Responsabilités	73
Annexe III Publications	75

Introduction

Après une thèse sur le calcul des propriétés optiques et de la conductivité du silicium poreux¹, j'ai intégré l'équipe Microélectronique Silicium de l'Institut d'Electronique, de Microélectronique et de Nanotechnologies en 1997. Une partie des activités de cette équipe porte sur la simulation des procédés de fabrication des composants microélectroniques en silicium. Il s'agit d'aider au développement et à l'optimisation des technologies en apportant le soutien d'une simulation moins coûteuse que la réalisation et la caractérisation systématique. Pour cela, des modèles ont depuis longtemps été développés dans l'équipe, développements résolus numériquement par la méthode des éléments finis dans un code en fortran appelé IMPACT². A mon arrivée, deux axes principaux étaient étudiés : l'oxydation du silicium et les contraintes d'une part, domaine de prédilection de Vincent SENEZ, la formation des jonctions p/n d'autre part, une activité développée par Bruno BACCUS qui venait de partir. C'est sur ce deuxième thème que j'ai commencé mon activité, et plus précisément sur la simulation des défauts étendus qui se forment lors de la réalisation des jonctions p^+/n ultraminces. En effet, la base de modèles de diffusion des dopants était déjà assez fournie, avec une prise en compte des états de charges des différentes espèces (dopants et défauts ponctuels) et de divers niveaux d'équilibre entre les réactions. Toutefois, ces modèles ne permettaient pas de prédire la diffusion transitoire accélérée et donc la profondeur des jonctions. Une extension de la base de modèles permettant de décrire les défauts étendus était nécessaire. Ce développement de modèles est présenté dans la première partie de ce manuscrit, intitulée "Simulations continues des défauts étendus". Cette activité, que j'ai d'abord menée en dehors de tout cadre contractuel mais en collaboration avec le CEMES à Toulouse, s'est poursuivie dans le cadre du projet européen FRIENDTECH de 2001 à 2004, puis dans le cadre du projet intégré NanoCMOS de 2004 à 2006, ainsi que dans le laboratoire commun ST/IEMN de 2003 à 2005. Durant cette première période, j'ai bénéficié de la collaboration locale avec Vincent SENEZ, qui restait le dernier des développeurs initiaux d'IMPACT, ainsi qu'avec ses doctorants,

avec Tahsin AKALIN et avec Emmanuel DUBOIS. Les interactions avec les toulousains du CEMES, Alain CLAVERIE, Benjamin COLOMBEAU et Caroline BONAFOS, et du LAAS, Fuccio CRISTIANO, Younes LAMRANI et Damien CONNÉTABLE, ainsi qu'avec Christophe ORTIZ, aujourd'hui à l'université d'Alicante en Espagne, et Nick COWERN aujourd'hui à l'université de Newcastle en Grande-Bretagne, ont également enrichi toute cette activité de modélisation des défauts étendus.

Dans un second temps, mon activité a évolué afin d'être en phase avec l'évolution des technologies silicium. Il devient en effet impératif, au vu des dimensions réduites non-seulement de la zone dopée mais également de tout le dispositif, d'utiliser des méthodes d'étude à l'échelle atomique en plus des simulations continues classiques. Les dispositifs réels ne sont toutefois pas suffisamment petits pour pouvoir entrer complètement dans un outil de simulation atomistique. C'est pourquoi l'approche que j'ai choisie consiste pour l'instant à utiliser l'outil atomistique pour calculer des paramètres qui interviennent dans les outils continus. C'est le cas pour la diffusion du bore dans le silicium et pour la recristallisation du silicium préamorphisé, deux aspects que je développe dans le second chapitre de ce manuscrit intitulé "Simulations atomistiques pour les jonctions ultraminesces". Cette activité, réalisée en étroite collaboration avec Christophe KRZEMINSKI, a débuté en 1999, date à laquelle j'ai commencé à écrire le code de dynamique moléculaire MODYC³. L'activité a ensuite été intégrée dans les thématiques du laboratoire commun ST/IEMN, et plus récemment dans le projet intégré PullNANO, suite du projet NanoCMOS. Son développement a grandement bénéficié de l'expérience en dynamique moléculaire que Fabrizio CLERI a bien voulu me faire partager, ainsi que du travail de Valérie CUNY, Quentin BRULIN et Emmanuel LECAT.

Ce manuscrit a été bâti autour de mes publications, en complétant les articles de revues par des introductions et des présentations générales de mes travaux. Ainsi, dans le second chapitre, la méthode utilisée (dynamique moléculaire) est détaillée puisqu'elle n'apparaît que succinctement dans les publications, alors que les applications de la méthode sont présentées de façon plus succincte, le lecteur étant invité à rechercher plus de détails sur celles-ci dans les articles reproduits à la fin du manuscrit.

Chapitre I

Simulations continues des défauts étendus

La première partie de mon activité dans l'équipe Microélectronique Silicium a porté sur le développement et l'implémentation de modèles des défauts étendus. Les défauts étendus se forment lors du recuit post-implantation réalisé pour former des jonctions p^+/n ultramines à base de bore. Ils sont intimement liés à la diffusion transitoire accélérée (*Transient Enhanced Diffusion* ou TED en anglais) du bore, d'où le besoin de les décrire. Après une première partie introductive sur les défauts étendus et la TED du bore, un modèle dit "thermodynamique" des boucles de dislocation est présenté dans la deuxième partie, puis le travail sur le modèle de croissance atome par atome dans la troisième partie.

1 Les défauts étendus et la diffusion transitoire accélérée du bore

La réalisation de jonctions p^+/n ultramines par implantation ionique pose un véritable défi technologique. Le dopant p classique en microélectronique silicium est le bore. Pour réaliser une jonction mince, une première solution est de réduire fortement l'énergie d'implantation de cet ion, tout en utilisant une dose élevée pour réduire la résistance associée, ce qu'on appellera l'*implantation directe*. La seconde solution est d'introduire une étape préalable à l'implantation du bore : l'implantation d'un ion lourd et neu-

tre vis-à-vis du dopage, comme le silicium ou le germanium. Implantés à haute dose, le silicium ou le germanium détruisent la structure cristalline du silicium et la rendent amorphe. Les canaux cristallins étant détruits, le bore pénètre moins profondément lors de l'implantation (voir Fig. I.1). Cette solution sera appelée *cas préamorphisé* dans la suite.

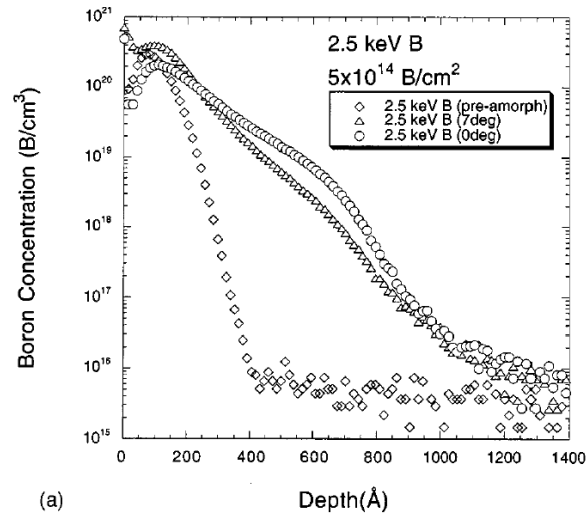


Figure I.1: Profil de bore implanté à 2.5 keV et $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ dans le Si cristallin à des angles de 0 et 7° et dans le Si préamorphisé. Extrait de la référence 4.

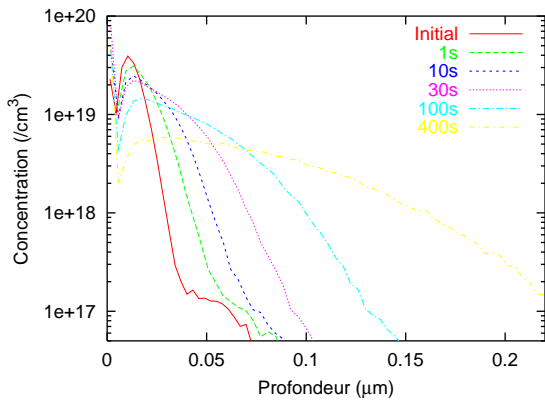


Figure I.2: Profils SIMS de bore après implantation dans du Si préamorphisé et au cours du recuit. Expérience et caractérisation réalisées au CEMES et au LAAS.

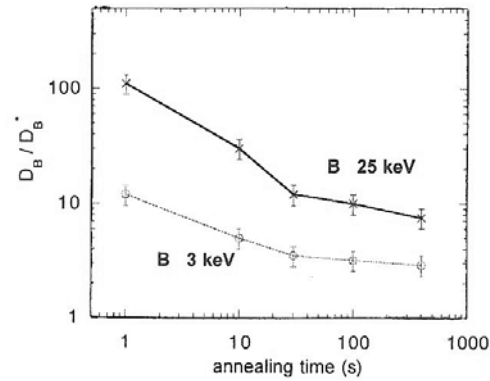


Figure I.3: Accélération de la diffusion au cours du recuit correspondant aux profils SIMS ci-contre (pour l'implantation à 3 keV). Extrait de la référence 5.

Dans un cas comme dans l'autre, les profils relativement peu profonds obtenus après implantation s'élargissent toutefois d'avantage par rapport aux prédictions des lois de diffusion à l'équilibre thermodynamique. La Fig. I.2 présente le cas d'une implantation

de B, 3 keV, 10^{14} cm^{-2} après préamorphisation par Ge, 150 keV, $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ et recuit à 1000 °C pendant différentes durées. L'évolution des profils au cours du recuit a été ajustée afin de déterminer un coefficient de diffusion D_B . Ce coefficient est ensuite normalisé par le coefficient de diffusion à l'équilibre thermodynamique D_B^* . On obtient alors l'accroissement de la diffusion D_B/D_B^* qui est représenté Fig. I.3. Sur cette figure, on voit que la diffusion est augmentée puisque D_B/D_B^* est supérieur à 1. Par ailleurs, l'augmentation diminue au cours du temps, d'où le nom de diffusion transitoire accélérée donné au phénomène.

De nombreuses expériences de microscopie ont permis de corrélérer cette TED à la présence de défauts étendus. Ces défauts étendus sont des précipités de silicium et se forment pendant le recuit à partir de l'excès de Si en site interstitiel créé par l'implantation. Les défauts étendus les plus petits sont des agrégats de quelques atomes qui peuvent grossir en défauts allongés situés dans les plans cristallins $\{113\}$ et équivalents (Fig. I.4)

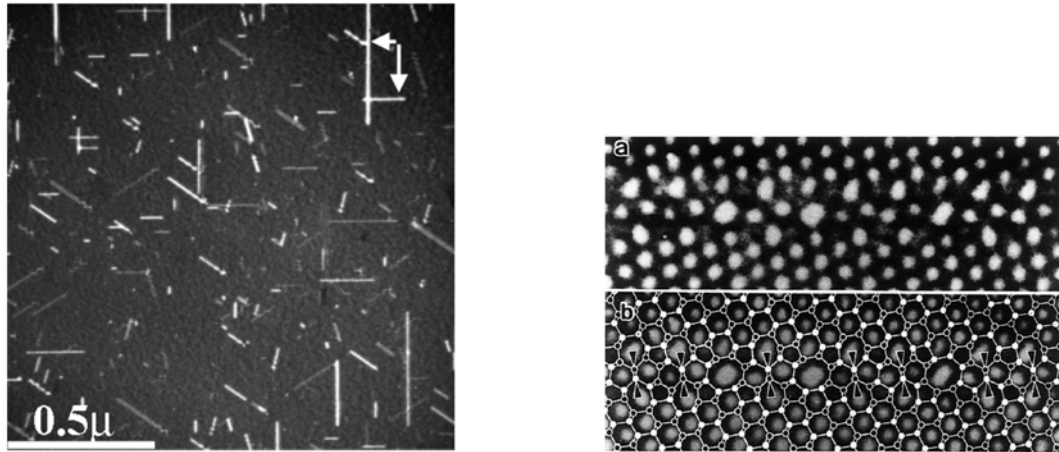


Figure I.4: Défauts $\{113\}$. A gauche, image TEM en vue plane⁶. A droite, image HRTEM sur la tranche⁷ (a) et modèle atomique correspondant (b).

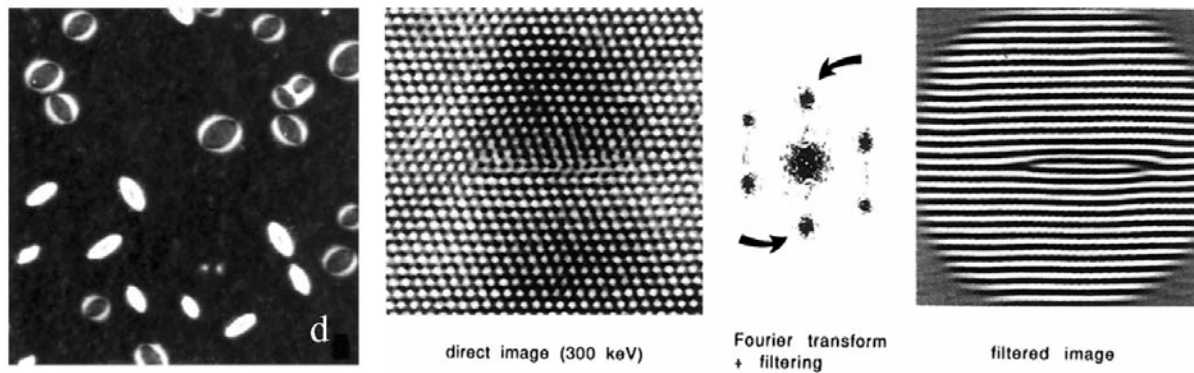


Figure I.5: Boucles de dislocation. A gauche, image TEM en vue plane⁸. A droite, image HRTEM sur la tranche et de sa transformée de Fourier filtrée⁷.

puis en boucles de dislocation de quelques dizaines de nm de diamètre (Fig. I.5), la géométrie la plus stable.

La présence de ces défauts étendus et les échanges d'atomes de Si entre eux maintient un excès de Si interstitiels dans la région où ils se forment. Or de nombreux travaux, repris dans le livre de Peter PICHLER⁹ ont mis en évidence que le mécanisme par lequel le bore diffuse est l'interaction d'un Si interstitiel avec un atome de bore en site substitutionnel. Cette interaction place l'atome de bore en site interstitiel où il devient mobile (phénomène de *kick-out*, Fig. I.6). Le lien est donc direct entre les défauts étendus et la diffusion transitoire accélérée du bore.

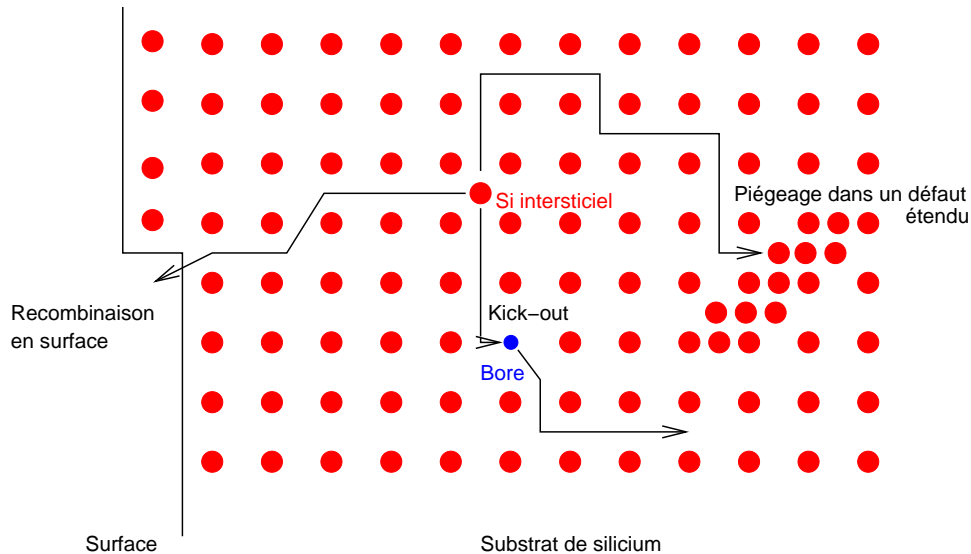


Figure I.6: Schéma des différents mécanismes de recombinaison des interstitiels de Si : piégeage par un défaut étendu, interaction avec un atome de bore pour le faire diffuser et recombinaison à la surface.

Un autre aspect entre en jeu : la recombinaison des Si interstitiels à la surface (Fig. I.6). Dans le cas de la préamorphisation, les défauts étendus se forment au niveau de l'interface amorphe/cristal. La zone amorphe sépare donc les défauts étendus de la surface. Il a été montré que dans ce cas, l'interface amorphe/cristal agit comme une barrière pour la diffusion des interstitiels vers la surface. La recombinaison en surface n'a donc pas lieu tant que la zone amorphe n'est pas totalement recristallisée. Cela laisse le temps aux défauts étendus d'évoluer jusqu'à la géométrie la plus stable, celle des boucles de dislocation. Le modèle dit "thermodynamique" présenté dans la partie suivante est alors bien adapté. Dans le cas d'une implantation directe, la compétition entre la surface et les

défauts étendus fait que la géométrie de boucle de dislocation n'est pas forcément atteinte et qu'il peut même y avoir dissolution des défauts étendus. Le modèle de croissance atome par atome des défauts étendus permet de décrire toutes les familles de défauts étendus, leur croissance et le cas échéant leur dissolution. Ce modèle et ma contribution sont présentés dans la dernière partie de ce chapitre.

Dans les deux cas (modèle thermodynamique et modèle de croissance atome par atome), le modèle développé est ajusté et testé sur des expériences dédiées, où seuls les défauts étendus sont formés. Puis lorsque le modèle est validé, il est alors appliqué à des expériences réelles de TED, où défauts étendus et bore sont présents.

2 Modèle “thermodynamique” des boucles de dislocation

Historiquement, c'est le premier modèle que j'ai développé, en étroite collaboration avec Alain CLAVERIE et Caroline BONAFOS du CEMES. Il est développé dans l'optique d'une formation de défauts étendus derrière une interface amorphe/cristal, et donc relativement éloignés de la surface. Cette approche est basée sur la description de la vie des boucles en trois phases : leur nucléation, leur croissance pure et leur maturation dite d'Ostwald. La nucléation est la création des précipités à partir de l'excès d'intersticiels créés par la phase d'implantation. Elle fait appel à la notion de taille critique pour que le défaut se crée. La croissance pure intervient ensuite lorsque cet excès d'intersticiels est devenu trop bas pour que d'autres boucles apparaissent mais suffisamment élevé pour que les boucles existantes grossissent en absorbant des intersticiels. La troisième phase est un équilibre dynamique entre les boucles qui se caractérise par un échange d'atomes des petites vers les grosses boucles. Dans cette phase,

1. le rayon moyen des boucles augmente avec le temps,
2. la densité totale de boucles diminue avec le temps,
3. les échanges d'intersticiels de silicium entre les boucles contribuent à maintenir une sursaturation (excès par rapport à la valeur à l'équilibre) d'intersticiels au niveau

de la région des boucles. Cette sursaturation diminue au cours du temps, mais plus lentement que si les boucles n'existaient pas, d'où la diffusion transitoire du dopant.

J'ai incorporé ce modèle dans IMPACT², le code de simulation de procédés technologiques de l'équipe utilisant la méthode des éléments finis pour résoudre les équations. Cela a permis de coupler le modèle des boucles de dislocation lui-même aux équations de diffusion des dopants et défauts ponctuels déjà existants dans le code. La Fig. I.7 montre le résultat obtenu grâce à ce modèle dans le cas d'une préamorphisation par Ge, 150 keV, $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. Les densités et dimensions des boucles de dislocation sont en très bon accord avec l'expérience, et ceci avec un minimum de paramètres ajustables, essentiellement l'excès d'interstitiels initial.

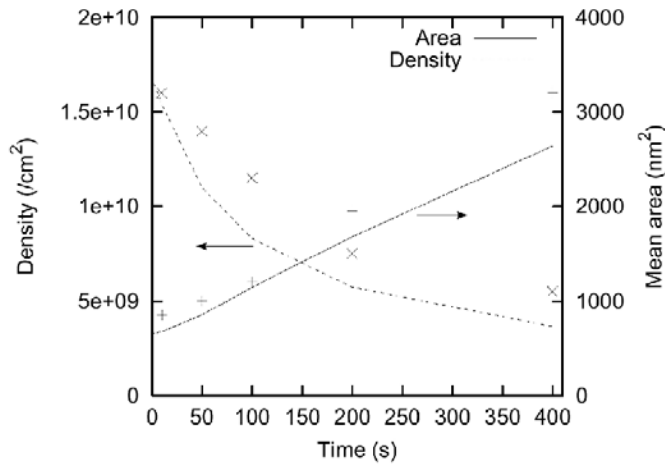


Figure I.7: Densité et aire des boucles de dislocation mesurées (points) et simulées (lignes). Extrait de la référence 10.

Si on entre dans IMPACT un profil de bore après implantation, l'évolution de ce profil au cours du recuit est obtenue grâce au couplage des équations de diffusion (assistée par défauts ponctuels) du dopant et du modèle des boucles de dislocation. Les Figs. I.8 et I.9 montrent le résultat obtenu pour une implantation "peu profonde" (B, 3 keV, 10^{14} cm^{-2}) et une plus profonde (B, 25 keV, $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$) consécutives à la préamorphisation par Ge, 150 keV, $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$. Le paramètre nécessaire à la simulation présentée Fig. I.7 (quantité initiale d'interstitiels) n'a pas été modifié. Seule la vitesse de recombinaison des interstitiels à la surface a été ajustée pour le profil qui y est le plus sensible (3 keV), et maintenu tel quel pour le profil plus profond (25 keV). Le modèle est donc assez bien prédictif avec un minimum de paramètres. Ces travaux ont été publiés dans le *Journal of*

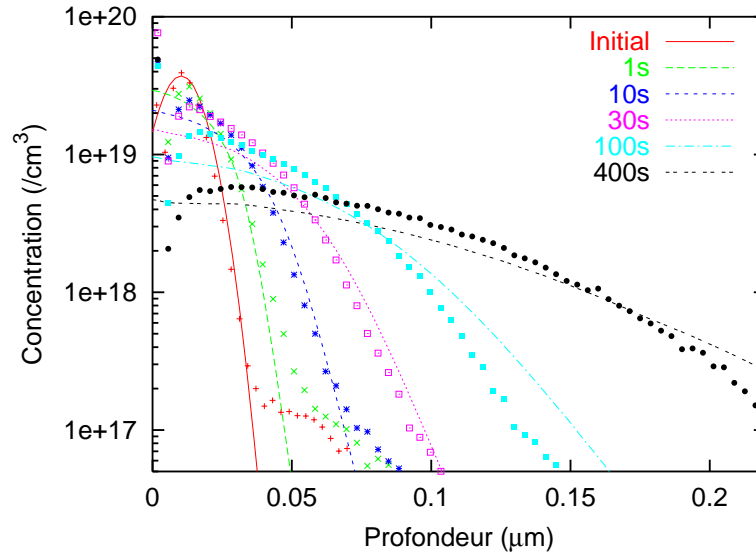


Figure I.8: Implantation peu profonde dans Si préamorphisé recuite à $1000\text{ }^{\circ}\text{C}$. Expériences réalisées au CEMES et au LAAS (points). Simulations avec IMPACT (lignes).

*Applied Physics*¹¹. On trouvera l'article correspondant en annexe de ce mémoire.

Par la suite (en 2003-2004), j'ai repris ce modèle avec Tahsin AKALIN dans le cadre du laboratoire commun ST/IEMN. Le but était de transférer le modèle dans un code commercial appelé FLOOPS¹² de la société ISE (rebaptisé Sentaurus Process lors du rachat de ISE par SYNOPSYS). Le transfert était demandé parce que ST prévoyait d'utiliser FLOOPS pour faire ses simulations de procédés technologiques en interne. Ce transfert est concrètement possible car FLOOPS peut lire des scripts, écrits dans un langage propre mais basé sur le Tcl (Tool Command Language). A cette occasion, le modèle a été perfectionné. En effet, sa faiblesse est de reposer sur un seul type de défauts étendus, les boucles de dislocation. Or on sait très bien maintenant que ce n'est pas le cas : les défauts étendus contenant jusqu'à 10 atomes à peu près sont des petits agrégats, puis ils se transforment en défauts $\{113\}$ avant de se changer en boucles de dislocation. Il existe une modélisation de ces agrégats et défauts $\{113\}$, c'est le modèle de croissance atome par atome qui est présenté dans la partie suivante de ce manuscrit. Le modèle a par ailleurs été intégré dans FLOOPS lors du projet européen FRENDECH. Afin d'être plus fidèle à la physique de l'évolution des défauts étendus, nous avons utilisé le modèle de croissance atome par atome pour la première phase de la croissance. Puis la maturation d'Ostwald est décrite selon le modèle thermodynamique, tout cela étant effectué dans FLOOPS. La Fig. I.11 montre le résultat de ce couplage pour les profils d'interstitiels libres et de défauts étendus après amorçage par Ge, 150 keV, $2 \times 10^{15}\text{ cm}^{-2}$. On y

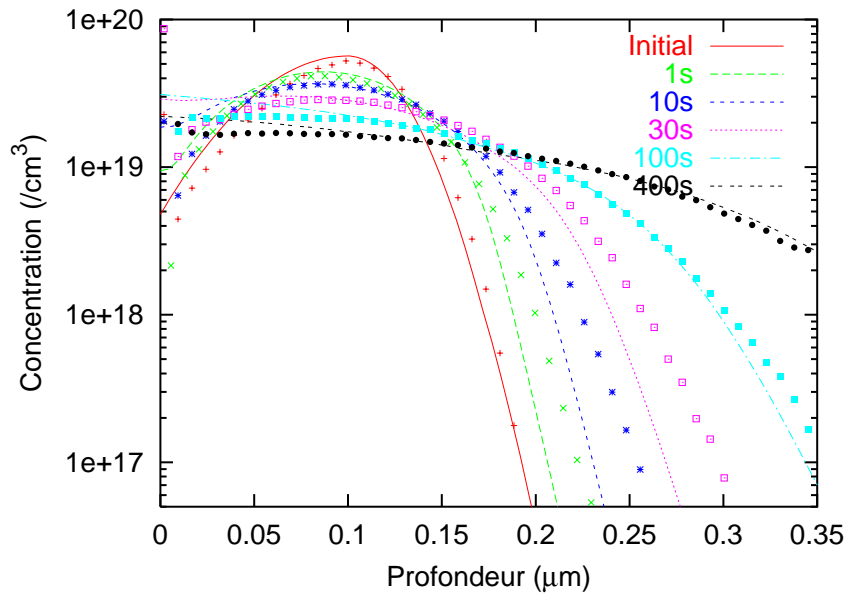


Figure I.9: Implantation profonde dans Si préamorphisé recuite à 1000°C . Expériences réalisées au CEMES et au LAAS (points). Simulations avec **IMPACT** (lignes).

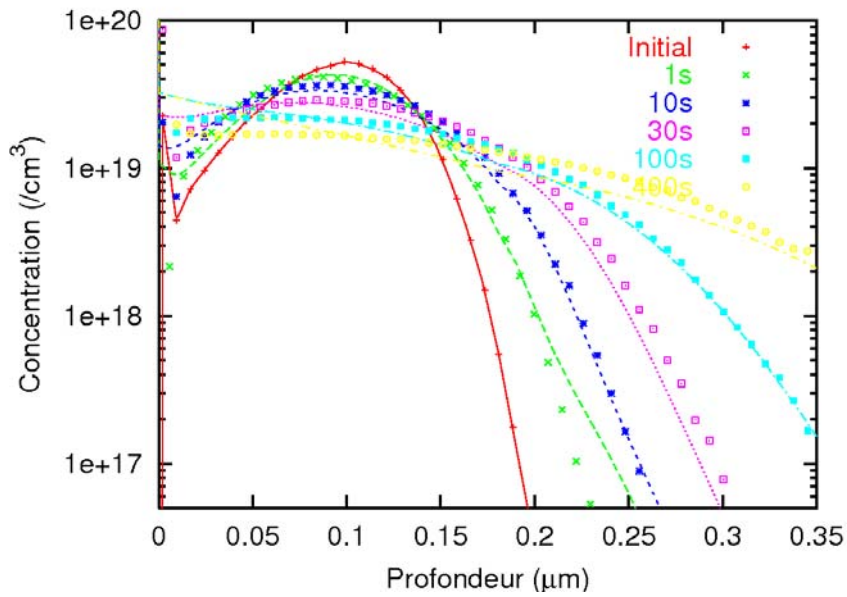


Figure I.10: Profils après implantation et au cours du recuit à 1000°C . Expériences réalisées au CEMES et au LAAS (points). Simulations avec **FLOOPS** (lignes).

voit notamment la décroissance lente du profil d'intersticiels libre causée par la présence des défauts étendus. L'accord avec l'expérience (Fig. I.10, B, 25 keV, $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ après préamorphisation par Ge, 150 keV, $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$) est légèrement amélioré par rapport à la version initiale du modèle implémentée dans IMPACT (Fig. I.9). Les différences sont dues à l'utilisation du modèle de croissance atome par atome pour la première phase de croissance dans la version FLOOPS. Les différences dans la résolution numérique sont probablement aussi responsables de ces écarts.

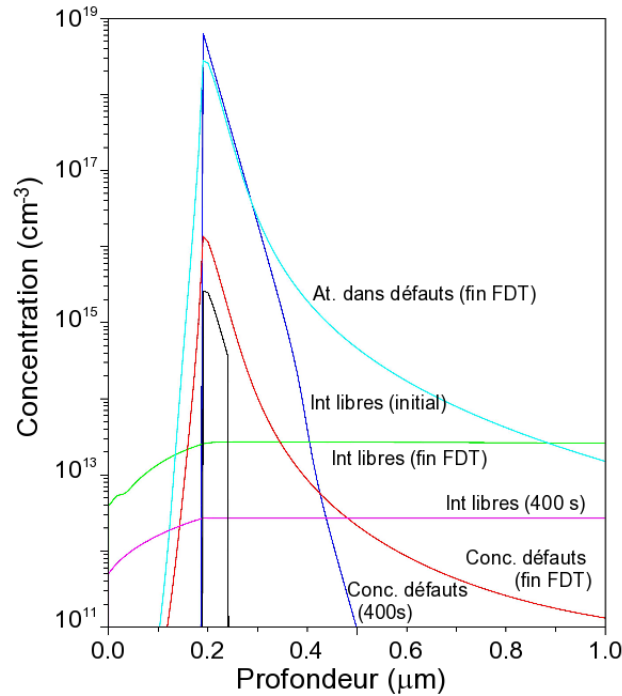
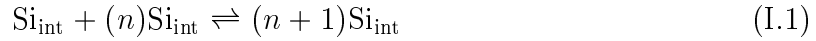


Figure I.11: Profils d'intersticiels libres et de défauts à différents instant du recuit (après implantation "As impl.", à la fin de la phase atome par atome "fin FDT" et après 400s) à 1000 °C. Simulations avec FLOOPS.

3 Modèle de croissance atome par atome des défauts étendus

3.1 PRÉSENTATION DU MODÈLE

Ce modèle prend en compte les défauts étendus contenant de $n = 2$ à $N_{\max} = 10000$ à 30000 atomes (10000 si on s'arrête aux défauts {113}, 30000 si on va jusqu'aux boucles de dislocation) en décrivant la croissance des précipités par émission et capture d'un atome de Si interstitiel (Si_{int}) à la fois :



ce qui se formalise par l'équation maîtresse :

$$\frac{dN_n(t)}{dt} = F_{n-1}N_{n-1} - F_nN_n + R_{n+1}N_{n+1} - R_nN_n \quad (\text{I.2})$$

où $N_n(t)$ est la densité de défauts étendus contenant n atomes au temps t . F_n et R_n sont les taux de réaction directe et inverse de la réaction I.1. Ils s'écrivent¹³⁻¹⁵:

$$R_n = D_1 C_1^* \times \frac{A_n}{R_{\text{eff}}} \times \exp\left(\frac{E_f(n)}{kT}\right), \quad (\text{I.3})$$

où $D_1 C_1^*$ est le coefficient d'auto-diffusion des interstitiels de Si dans le silicium, $E_f(n)$ l'énergie de formation d'un défauts de n atomes, et A_n/R_{eff} son coefficient de capture, et :

$$F_n = D_1 C_1^* \times \frac{A_n}{R_{\text{eff}}} \times S \quad (\text{I.4})$$

où S est la sursaturation (C_1/C_1^*) d'interstitiels de silicium. Les coefficients de capture sont calculés analytiquement à partir de la géométrie des défauts (sphérique pour les petits agrégats¹⁵, rectangulaire pour les défauts {113}¹⁵ et sous forme de disque pour les boucles de dislocation¹⁶). Les énergies de formation des petits agrégats (jusqu'à environ 10 atomes), ainsi que deux paramètres intervenant dans l'expression analytique de l'énergie de formation des défauts {113}¹⁵ (énergie de faute et vecteur de Burger) sont des paramètres du modèle qu'il convient d'ajuster. L'énergie de formation des boucles de dislocation¹⁷ peut s'écrire sans paramètres.

Pour résoudre ces équations, il faut donc théoriquement connaître la distribution du profil d'interstitiels (C_1 ou la sursaturation S), ce qui demande l'intégration dans un code

comme IMPACT qui résout les équations de diffusion des dopants/défauts ponctuels. Pour simplifier, le modèle a d’abord été implémenté par Nick COWERN et ses collaborateurs¹³, puis repris et étendu au CEMES par Alain CLAVERIE et ses collaborateurs¹⁴ en supposant un état stationnaire dans lequel la sursaturation S a la forme présentée sur la Fig. I.12. Cette forme résulte de la diffusion dans la profondeur, de l’interaction avec les défauts

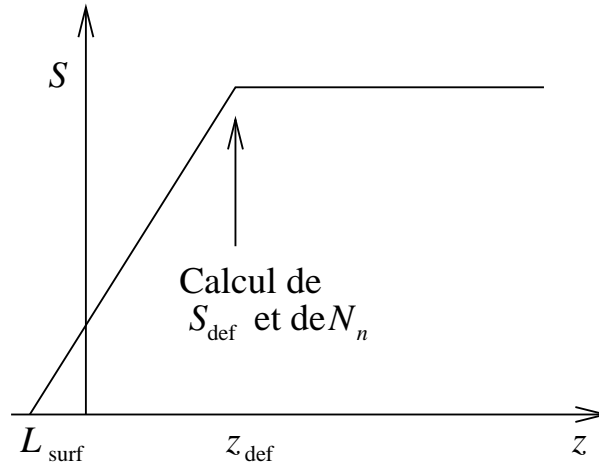


Figure I.12: Allure de la sursaturation d’intersticiels utilisée dans la version simplifiée du modèle.

étendus à la profondeur z_{def} où ils sont créés et de la recombinaison en surface après avoir parcouru la distance L_{surf} . Cette hypothèse permet de résoudre le système d’équations à un seul point de la profondeur, $z = z_{\text{def}}$ sans avoir recours à la résolution des équations de diffusion des espèces. Un programme en FORTRAN, enrichi au cours de ses passages chez les différents collaborateurs (Nick COWERN et ses collaborateurs, puis Alain CLAVERIE et ses collaborateurs, puis moi-même d’abord seule puis en interaction avec Fuccio CRISTIANO et ses collaborateurs) permet de résoudre ce problème à 0D, avant de l’implémenter éventuellement dans FLOOPS ou un autre simulateur pour passer au 1D voire 2D.

Ma contribution s’est faite en trois phases. Dans un premier temps, j’ai couplé la sursaturation S sortant du modèle aux équations de diffusion des dopants dans IMPACT afin de tester le modèle sur la TED du bore. Dans un second temps, j’ai travaillé à optimiser à la fois l’implémentation numérique du modèle et les paramètres qu’il contient, ce qui a permis de le transférer dans le code commercial FLOOPS. Enfin, j’ai contribué à améliorer la modélisation de la transformation des défauts $\{113\}$ en boucles de dislocation.

Dans un premier temps, j'ai donc mis au point un couplage avec IMPACT en intégrant la quantité d'interstitiels en excès issu d'un calcul préalable à 0D de l'évolution des défauts étendus. Ce couplage a été utilisé pour simuler tout d'abord le recuit de "diracs de bore". Dans ce genre d'expérience^{13,18}, on réalise par épitaxie une série de couches très minces fortement dopées au bore, que l'on implante par la suite avec un ion neutre pour le dopage comme le silicium ou le germanium (voir Fig. I.13). Lors du recuit, les interstitiels créés

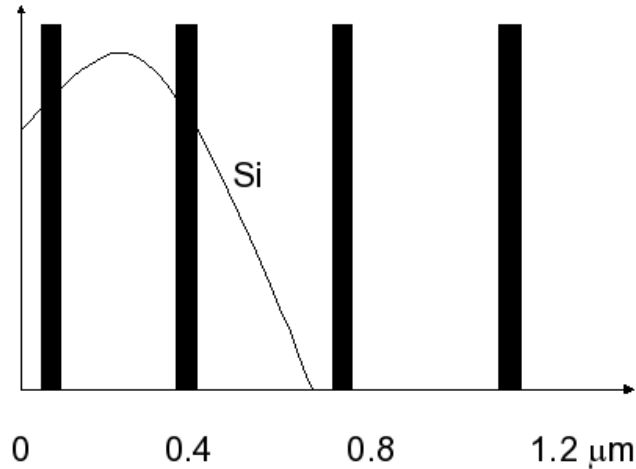


Figure I.13: Principe des expériences de diracs de bore implantés avec du Si ou Ge.

par l'implantation de Si ou Ge précipitent et forment des défauts étendus que l'on peut observer en microscopie. Parallèlement, les profils de bore s'élargissent, différemment en fonction de la profondeur (voir Fig. I.14). La caractérisation du profil de bore par SIMS permet alors de remonter à la TED subie par le bore des diracs. Ainsi, cette expérience permet à la fois de tester la modélisation de la croissance des défauts et celle de la TED du bore, et elle est donc très utile pour valider des modélisations qui seront utilisées ultérieurement pour des applications technologiques.

Le travail qui a été fait est donc :

- la résolution numérique (à Toulouse, au CEMES et/ou au LAAS) du système d'équations I.2 en régime stationnaire à OD et sortie de l'évolution de la sursaturation d'interstitiels S en fonction du temps à la profondeur des défauts. La Fig.

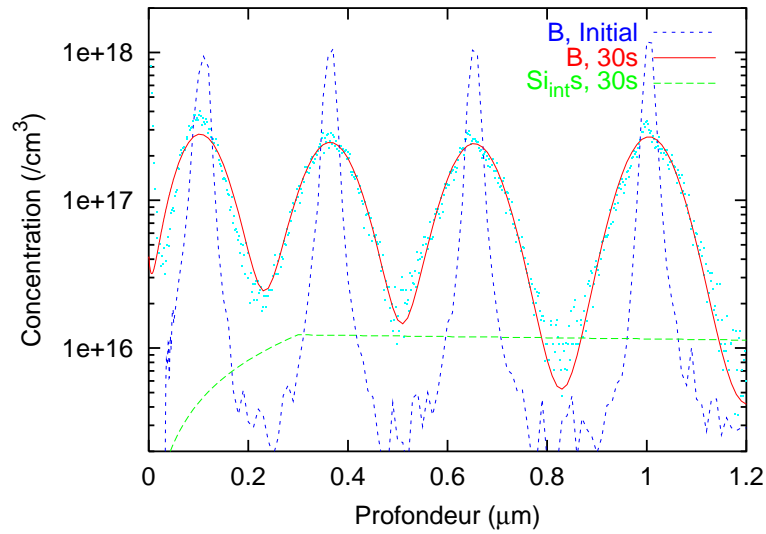


Figure I.14: Exemple de comparaison simulation/mesure sur une expérience de diracs de bore avec recuit à 850 °C. Les lignes sont les simulations, les points sont les mesures issues de Toulouse.

I.15 donne le résultat obtenu pour une implantation de Si, 100 keV, $2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ recuite à 850 °C.

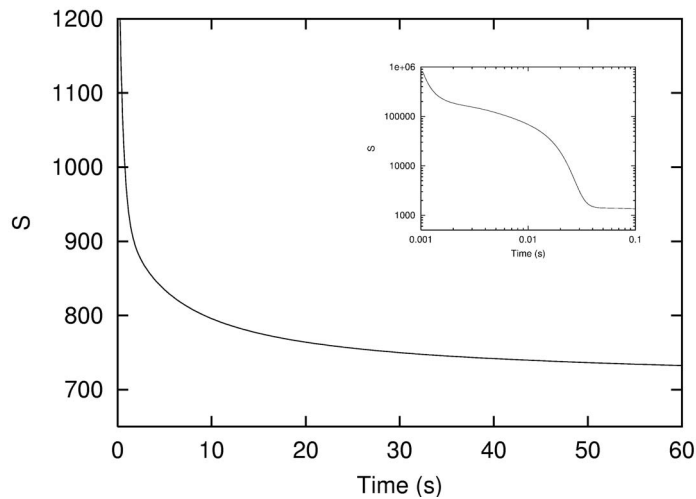


Figure I.15: Sursaturation d'intersticiels en fonction du temps calculée à Toulouse pour les conditions de la Fig. I.14.

- l'intégration de la sursaturation dans IMPACT. Le profil d'intersticiels se voit imposer une contrainte, celle d'épouser la valeur de S calculée précédemment à $z = z_{\text{def}}$. Le couplage bore-interstitiel de silicium et la diffusion du bore est laissé tel quel.

Le résultat est présenté sur la Fig. I.14 à 30 s de recuit. Le profil d'intersticiels obtenu est conforme à l'hypothèse faite (voir Fig. I.12, attention échelle logarithmique sur la Fig. I.14) et les profils de bore sont bien prédits. Les modèles de diffusion dans IMPACT n'ont pas été retouchés pour obtenir cet accord. Seule la diffusivité des intersticiels a été modifiée pour s'aligner sur la valeur utilisée à Toulouse pour le calcul de S . D'autres résultats montrant les capacités de cette approche à prédire la TED du bore sont présentés dans l'article de *Journal of Applied Physics*¹⁹ où ce travail a été publié.

Par ailleurs, l'approche a également été appliquée dans le cas d'une implantation de bore plus classique à 1 keV, $3 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ dans du silicium préamorphisé par implantation de Ge, 150 keV, $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$, destinée à former une jonction ultramince. La Fig. I.16 montre le résultat obtenu pour 3 températures de recuit, la sursaturation d'intersticiels étant recalculée à chaque température (voir Fig. I.17). L'accord avec l'expérience est une preuve que les défauts étendus sont effectivement à l'origine de la TED du bore.

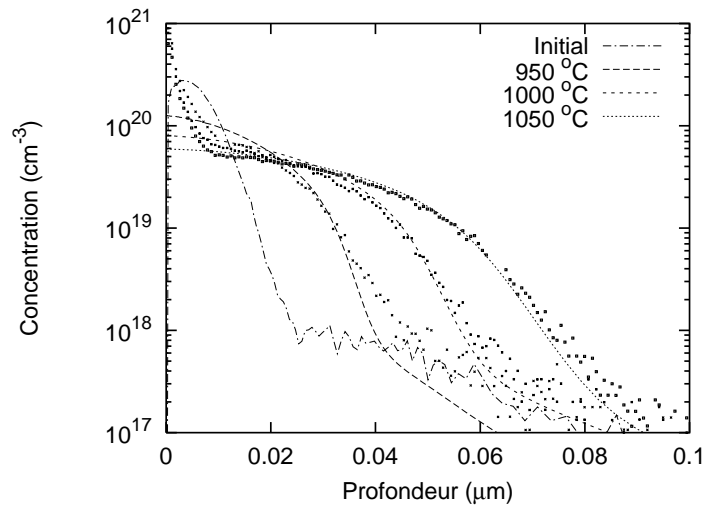


Figure I.16: Exemple de comparaison simulation/mesure pour une implantation de B recuite pendant 10 s à différentes températures. Les lignes sont les simulations, les points sont les mesures.

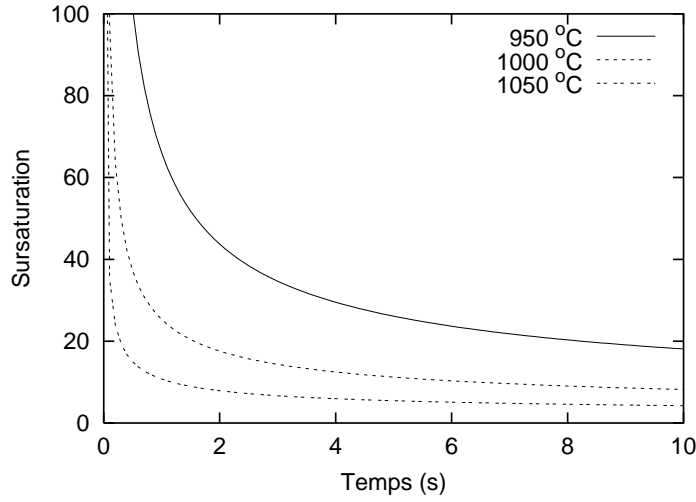


Figure I.17: Sursaturation d'intersticiels en fonction du temps calculée à Toulouse pour les conditions de la Fig. I.16.

3.3 OPTIMISATION DE LA RÉOLUTION EN APPROXIMATION STATIONNAIRE

Toutefois, l'approche développée dans la partie précédente ne peut être appliquée qu'au cas par cas. Pour une utilisation plus systématique, et également plus rigoureuse, avec profils 1D des défauts étendus, des intersticiels et des dopants, il faut passer à l'intégration dans un code de simulation de la diffusion des dopants. Or il y avait à l'époque un consensus autour de l'utilisation de FLOOPS (version ISE). Ce consensus, notamment entre les partenaires du projet européen FRIENDTECH dont ISE faisait partie, était fondé sur l'ouverture du code qui permettait d'échanger facilement des scripts de modèle développés par chacun. Cela était possible car, contrairement à IMPACT qui est écrit principalement en FORTRAN, FLOOPS est basé sur un langage interprété, le Tcl. L'avantage de cette formulation est donc la (relative) facilité d'y développer des modèles. L'inconvénient est la limite en capacité de calcul inhérente à toute application développée avec ce type de langage. Ainsi, le nombre maximum d'équations différentielles solvables par FLOOPS est de l'ordre de 50. Ce qui rend évidemment impossible la résolution directe du système d'équations I.2. J'ai donc contribué à reprendre ce système d'équations de manière à pouvoir l'implémenter avec un minimum d'équations.

Pour cela, l'équation I.2, reprise ci-dessous par souci de lisibilité :

$$\frac{dN_n}{dt} = F_{n-1}N_{n-1} - F_nN_n + R_{n+1}N_{n+1} - R_nN_n \quad (I.5)$$

a été transformée en équation continue pour les “grandes tailles” de défauts (à partir de 10 à 15 atomes) par expansion de Taylor tronquée. Cela donne l’équation de Fokker-Planck suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(\rho R - \rho F) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}(\rho F + \rho R). \quad (\text{I.6})$$

où x est la variable continue correspondant à n . $\rho(x, t)$, $R(x)$ et $F(x)$ sont respectivement les analogues continus de $N_n(t)$, R_n et F_n . La résolution de cette équation continue est ensuite faite en la discrétisant en un certain nombre de points.

Avant d’intégrer la version en nombre d’équations réduit dans FLOOPS, des tests ont été réalisés avec le programme FORTRAN 0D afin de pouvoir comparer la version réduite à la version complète et déterminer le nombre de points de discrétisation optimal. Les Figs. I.18 et I.19 présentent le résultat de la procédure pour une implantation de Si, 50 keV, 10^{14} cm^{-2} recuite à 740 °C. La Fig. I.18 donne l’histogramme des tailles après 10 s

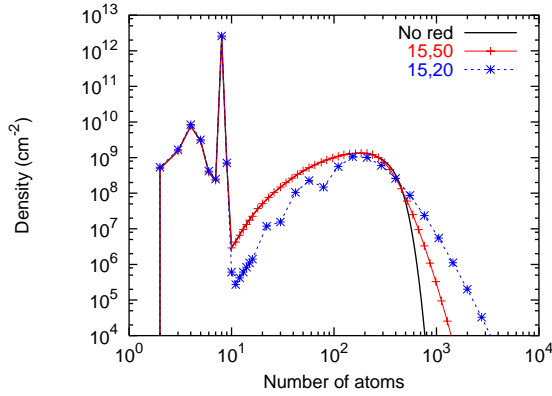


Figure I.18: Histogramme des tailles de défauts étendus après 10 s de recuit.

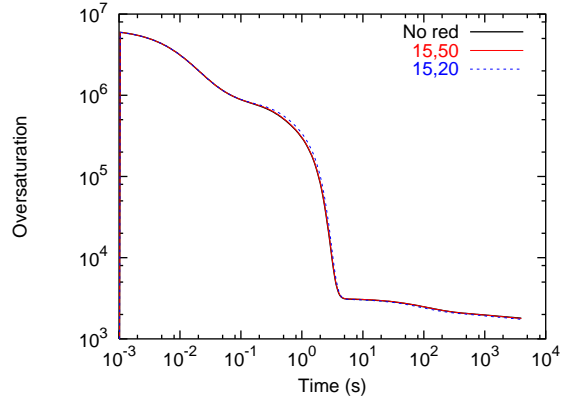


Figure I.19: Sursaturation d’intersticiels en fonction du temps de recuit.

de recuit. La Fig. I.19 donne la sursaturation d’intersticiels en fonction du temps de recuit. Sur chacune de ces Figs., la résolution complète (courbe en noir) est faite avec 10000 équations I.2, alors que les résolutions réduites sont faites avec 15 équations I.2 pour les plus petits défauts couplées à la résolution en 50 (courbe rouge) et 20 (courbe bleue) points de l’équation I.6. La sursaturation obtenue avec 15+20 est quasiment confondue avec celle qui est donnée avec la résolution complète. L’histogramme des tailles reste également bien décrit. La méthode est donc tout à fait indiquée pour réduire le nombre d’équations à résoudre (d’un facteur $10000/(15+20) \approx 30$).

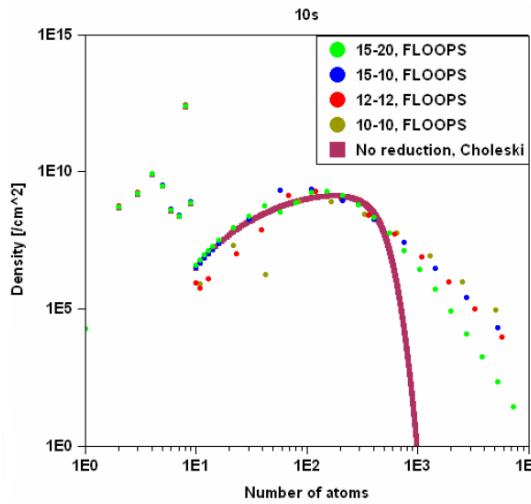
Cette approche a permis l’intégration du modèle de croissance des défauts étendus atome par atome dans FLOOPS. Le résultat du calcul sur la même expérience est donné

sur les Fig. I.20 et I.21. Les résultats sont tout à fait équivalents à ceux obtenus précédemment, mais avec cette fois-ci une résolution 1D des différentes grandeurs. Le temps de calcul ayant été réduit en même temps que le nombre d'équations, il a également été possible d'optimiser les paramètres du modèle, essentiellement les énergies de formation des petits agrégats. Les paramètres utilisés jusqu'alors dataient de la première version du modèle¹³, alors que le modèle et son implémentation avaient beaucoup évolué. Cela a été réalisé en utilisant une procédure de recuit simulé²⁰ pour se caler sur des valeurs expérimentales, comme la sursaturation et surtout le nombre d'atomes dans les défauts. L'utilisation de caractéristiques des défauts (densité, taille ou nombre d'atomes piégés) est indispensable pour écarter des solutions qui ne seraient pas physiques. La Fig. I.22 présente la sursaturation obtenue avant et après optimisation. Les points expérimentaux proviennent d'une expérience de diracs de bore¹³. La Fig. I.23 donne les énergies de formation découlant de l'optimisation. Le résultat des simulations a été légèrement amélioré (Fig. I.22). Les énergies de formation obtenues (Fig. I.23) après recuit simulé sont comparables à celle d'autres optimisations, sans toutefois de stabilité marquée de la taille $n = 8$ comme l'avaient trouvée Cowern et ses collaborateurs¹³.

3.4 RAFFINEMENT DE LA DESCRIPTION DE LA TRANSITION {113}-BOUCLES

Le modèle utilisé jusqu'à ce point considère une transition abrupte entre les défauts {113} et les boucles de dislocation à une taille critique de 350 atomes dans les défauts. Cette taille critique correspond au croisement des énergies de formation des deux types de défauts. Toutefois, la transformation n'est pas si abrupte dans la réalité comme le montrent les résultats expérimentaux des Figs. I.24, I.25 et I.26. Ces résultats sont obtenus après recuit à 800 °C d'une implantation de Si, 100 keV, $2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$. La Fig. I.24 illustre que le nombre total d'atomes dans les défauts reste constant pendant le recuit mais qu'une transformation des défauts {113} en boucles de dislocation commence vers peu de temps avant 200 s. Sur la Fig. I.25, on voit que les défauts {113} se dissolvent après 200 s alors que la densité de boucles est constante de 200 à 5000 s (celles qui existent grossissent donc).

La stabilité d'un type de défaut par rapport à l'autre est obtenue en comparant leur énergie interne. L'énergie interne $U(n)$ et l'énergie de formation $E_f(n)$ d'un défaut de n



Integrated Systems Engineering

Figure I.20: Equivalent de la Fig. I.18 mais obtenue avec FLOOPS.

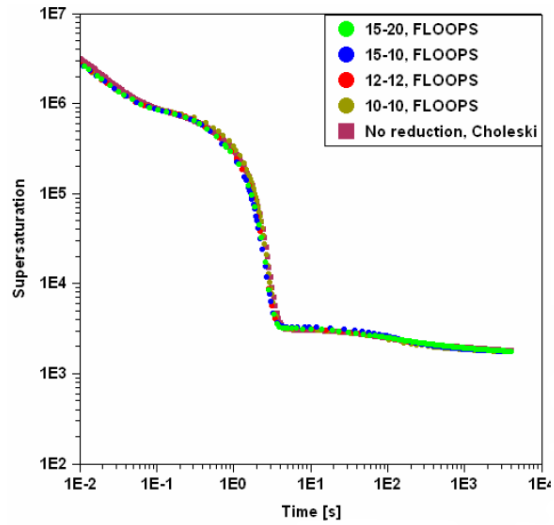


Figure I.21: Equivalent de la Fig. I.19 mais obtenue avec FLOOPS.

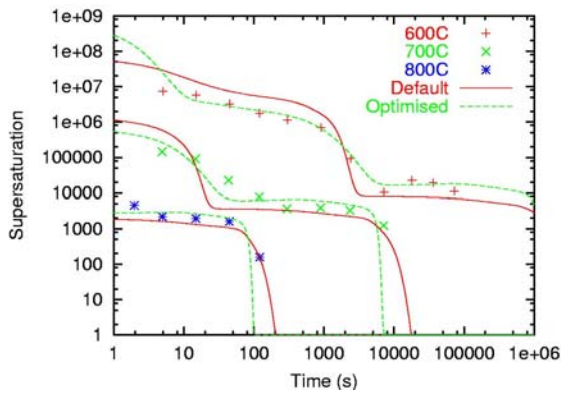


Figure I.22: Sursaturation d'intersticiels avant (ligne rouge) et après (ligne verte) optimisation, et extrait de SIMS (points).

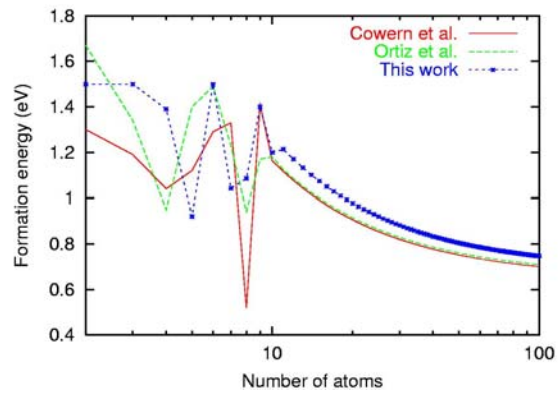


Figure I.23: Energie de formation avant (ligne rouge) et après (ligne bleue) optimisation, ainsi qu'une autre optimisation¹⁵ (ligne verte).

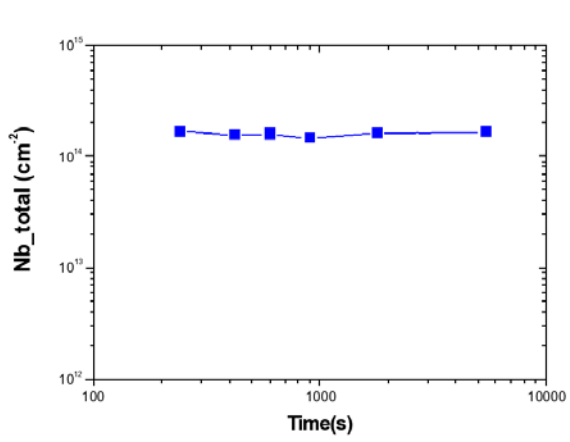


Figure I.24: Nombre d'atomes total dans les défauts étendus.

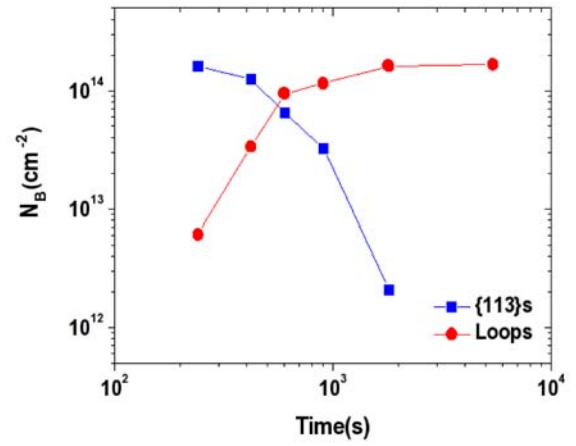


Figure I.25: Nombre d'atomes mesurés dans les défauts {113} (bleu) et les boucles de dislocation (rouge).

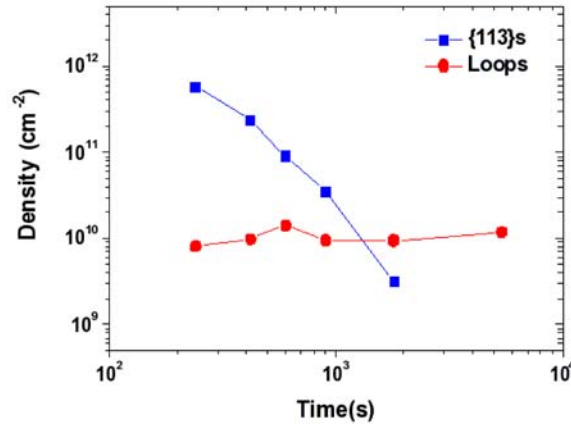


Figure I.26: Densité de défauts {113} (bleu) et de boucles de dislocation (rouge).

atomes sont liées par la relation :

$$E_{\text{f}}(n) = \frac{dU(n)}{dn} \quad (\text{I.7})$$

L'énergie interne est représentée sur la Fig. I.27. Les courbes correspondant aux défauts {113} et aux boucles de dislocation se croisent pour une taille d'environ 1000 atomes. En-dessous de cette taille, les défauts {113} sont plus stables, au-dessus, ce sont les boucles qui sont plus stables. Par ailleurs, partant des considérations connues sur les défauts, la barrière en énergie associée à la transformation doit avoir l'allure donnée sur la Fig. I.28. Ainsi, une barrière très élevée pour les petits défauts {113} fait qu'ils ne se transforment jamais en boucles de dislocation. La taille du défaut augmentant, cette barrière diminue pour permettre la transformation. Elle atteint ensuite une valeur asymptotique qui n'est pas nulle puisque l'on a pu observer de très longs défauts {113} qui ne se sont jamais

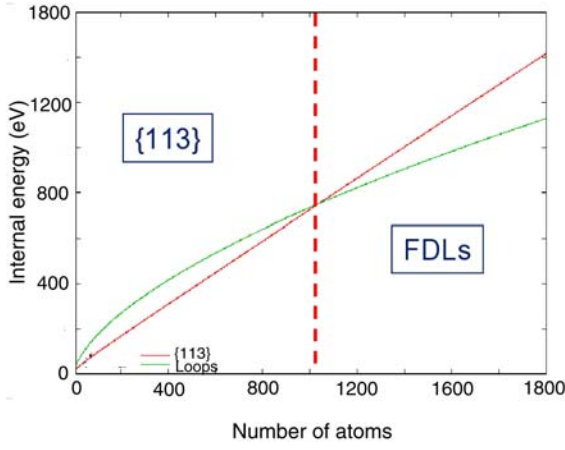


Figure I.27: Energie interne des défauts $\{113\}$ et des boucles de dislocation.

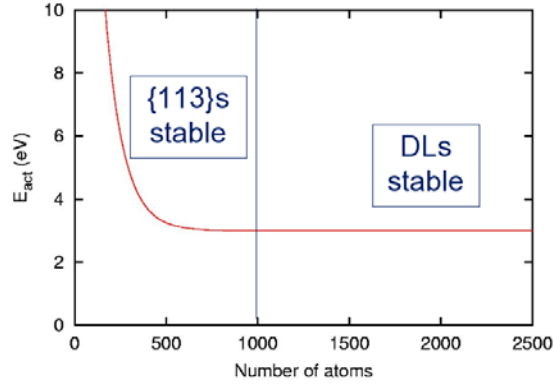


Figure I.28: Barrière en énergie pour la transformation des défauts $\{113\}$ en boucles de dislocation.

transformés en boucles de dislocation. Une approche simple peut ainsi être construite pour modéliser la transformation des défauts $\{113\}$ en boucles de dislocation. Elle consiste à définir une probabilité de peupler la famille de défauts $\{113\}$:

$$p(n) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{f(\Delta E(n))}{kT}\right)} \quad (\text{I.8})$$

où $f(\Delta E(n)) = f(U_{\{113\}}(n) - U_{\text{DL}}(n), E_a(n))$ est une fonction qui dépend de la différence en énergie interne entre les deux défauts, $U_{\{113\}}(n) - U_{\text{DL}}(n)$, et de la barrière $E_a(n)$ à franchir pour passer d'une géométrie à l'autre. Cette probabilité permet de déterminer la densité de défauts de chaque type :

$$N_n^{\{113\}} = N_n \times p(n) \quad N_n^{\text{DL}} = N_n \times (1 - p(n)) \quad (\text{I.9})$$

Ainsi, on résoud comme d'habitude le système d'équations I.2 pour obtenir N_n (voir Fig. I.29) et on applique ultérieurement une correction pour extraire les deux populations (Figs. I.30 et I.31). On n'alourdit donc pas la résolution numérique, le traitement est donc compatible avec l'intégration dans FLOOPS.

Deux types de fonctions f ont été testées, donnant une probabilité de transition soit douce soit plus abrupte. Les Figs. I.30 et I.31 montrent que l'on peut décrire relativement bien la transformation des défauts $\{113\}$ en boucles de dislocation avec cette formulation simple, une probabilité abrupte donnant par ailleurs un meilleur accord avec l'expérience. Ces travaux ont été réalisés en collaboration avec Fuccio CRISTIANO du LAAS et ses étudiants, Damien CONNÉTABLE et Younes LAMRANI. Ils sont présentés dans la thèse de Younes²¹ mais n'ont pas encore été publiés à ce jour.

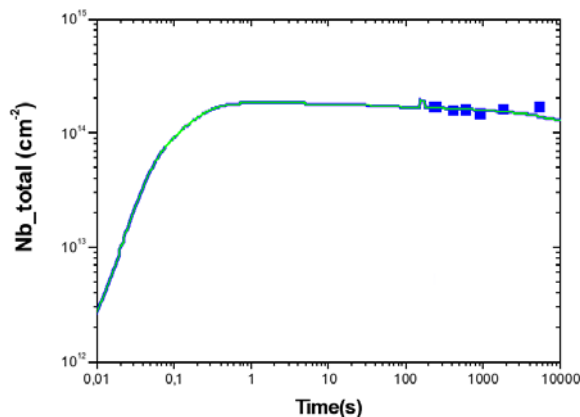


Figure I.29: Nombre d'atomes dans les défauts (N_n). Simulation (lignes bleue et verte) et mesure (points).

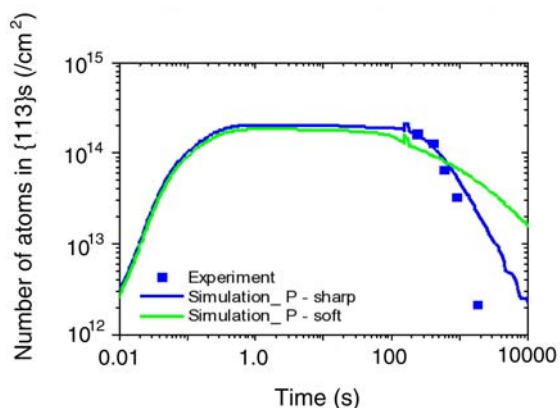


Figure I.30: Nombre d'atomes dans les défauts $\{113\}$. Simulation (lignes bleue et verte) et mesure (points).

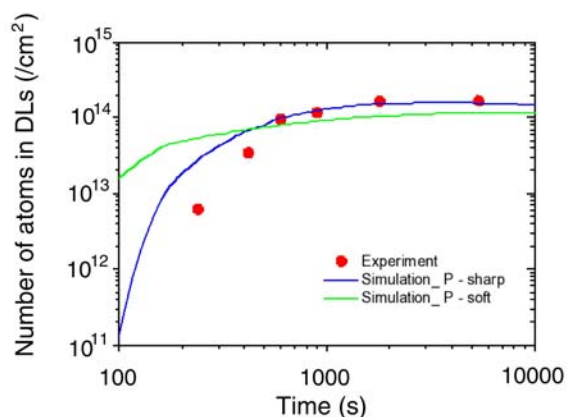


Figure I.31: Nombre d'atomes dans les boucles de dislocation (rouge). Simulation (lignes bleue et verte) et mesure (points).

4 Conclusion

Pas loin de dix années (1997 à 2006) ont été nécessaires pour modéliser et implémenter les différents aspects de ce phénomène. Le travail a porté sur deux approches de modélisation. L'approche thermodynamique est plus particulièrement adaptée au cas où une préamorphisation est utilisée. Elle est basée sur la description de la nucléation, la croissance pure et la maturation d'Ostwald des boucles de dislocation. Cette approche est implémentée dans IMPACT et dans FLOOPS. Elle permet de bien décrire l'évolution des boucles de dislocation et la diffusion transitoire accélérée du bore. Concernant la seconde approche, où la croissance des défauts est décrite atome par atome, ma contribution s'est faite sur le modèle déjà bien avancé que le LAAS et le CEMES avaient mis au point.

En le couplant dans IMPACT, j'ai pu valider que le modèle décrivait bien la TED. Puis j'ai optimisé son implémentation, ce qui a permis de l'intégrer dans FLOOPS pour une utilisation par un public plus large, ainsi que de mener une optimisation des paramètres. Enfin, j'ai contribué au raffinement de la description du passage des défauts $\{113\}$ aux boucles de dislocation.

A l'heure actuelle, le script FLOOPS du modèle thermodynamique est utilisé au sein de la société STMicroelectronics²². Une version simplifiée du modèle de croissance atome par atome est disponible pour les clients de SYNOPSYS dans le simulateur de procédés Sentaurus Process.

Chapitre II

Simulations atomistiques pour les jonctions ultra-minces

1 Introduction

Les simulations atomistiques présentées dans ce chapitre ont été réalisées avec le code MODYC³ que j'ai développé en partant de la structure de IMPACT² pour tout ce qui concerne la lecture du fichier d'entrée, la vérification de la syntaxe de ce fichier et le lancement du calcul. Ce code, mixte fortran/fortran 90, utilise des potentiels interatomiques empiriques pour réaliser des simulations de dynamique moléculaire ou des relaxations par gradients conjugués. L'aspect technique de ces simulations est présenté dans la première partie de ce chapitre. Puis une première application est présentée. Elle concerne la simulation de la diffusion du bore. Le but est de comparer le mécanisme obtenu en dynamique moléculaire avec le schéma classique de diffusion du bore assistée par défaut ponctuel⁹. Nous verrons que, bien que les potentiels empiriques aient un contenu physique limité (il n'y a pas d'effets quantiques comme dans les méthodes *ab initio* ou semi-empiriques) les effets observés et même certaines grandeurs comme la longueur de migration sont en très bon accord avec l'expérience. La seconde application porte sur la recristallisation du silicium. Ce gros travail, initié en janvier 2005, a pour but de tester la capacité de différents potentiels interatomiques à simuler l'épitaxie en phase solide du silicium. Nous verrons que cela nous a amenés à identifier des régimes d'épitaxie en phase solide et en phase liquide et à classer les cinq potentiels empiriques en fonction de leur tendance à

décrire l'un ou l'autre de ces deux régimes.

2 Méthode de simulation : la dynamique moléculaire basée sur des potentiels interatomiques empiriques

2.1 LES ÉQUATIONS DU MOUVEMENT

Principe La dynamique moléculaire consiste à intégrer numériquement l'équation de Newton pour un système de N particules dont l'énergie potentielle ne dépend que de la position des particules :

$$m_i \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = f_i(t) = -\frac{dV(r^N)}{dr_i(t)} \quad (\text{II.1})$$

où $V(r^N)$ est l'énergie potentielle du système à N particules qui ne dépend que des coordonnées cartésiennes r_i de l'atome i , m_i étant la masse de l'atome i . Le but est d'obtenir par intégration de cette équation la position de chaque atome au cours du temps. En pratique, les simulations de dynamique moléculaire classique utilisent une énergie potentielle contenant des termes à 2 et 3 corps.

Etat initial L'état initial, c'est-à-dire les positions et nature des atomes, sont généralement construites par l'utilisateur d'après la disposition d'équilibre présumée. Pour l'étude de la diffusion du bore dans le silicium, la structure diamant du silicium est construite en utilisant une routine, puis un atome de bore est disposé soit à la place d'un atome de silicium, soit dans un interstice du réseau cristallin. En ce qui concerne la recristallisation du silicium, la position des atomes dans l'amorphe ou le liquide est obtenu en partant d'une structure diamant et en appliquant soit un algorithme d'échange de liaisons, soit des recuits/trempes comme dans la réalité.

Intégration numérique Il existe plusieurs approches pour intégrer numériquement les équations du mouvement : par prédiction/correction, selon la méthode de Gear²³ ou en utilisant l'algorithme de Verlet²⁴. J'ai implémenté dans MODYC une variante particulière de cette seconde méthode, l'algorithme de Verlet "leap frog"²⁵ dont le principe est donné sur la Fig. II.1. Partant des positions $r(t)$, vitesses $v(t)$ et accélérations $a(t)$ à l'instant t ,

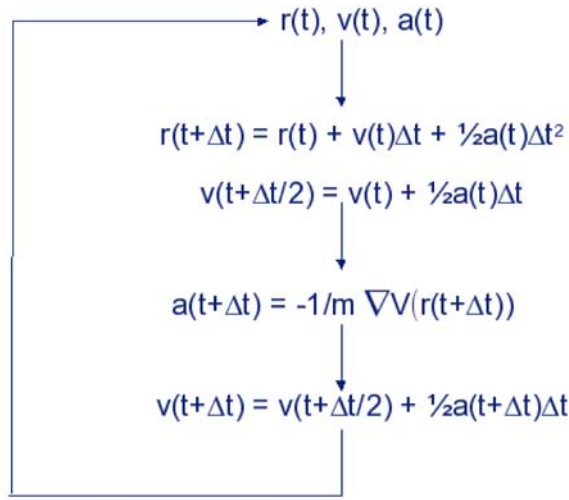


Figure II.1: Principe de l'algorithme Verlet "leap frog".

on détermine les positions $r(t + \Delta t)$ à l'instant $t + \Delta t$, où Δt est le pas de temps, ainsi que la vitesse à mi-pas de temps $v(t + \Delta t/2)$. $r(t + \Delta t)$ est ensuite utilisé en entrée du calcul des forces pour obtenir les accélérations $a(t + \Delta t)$. Puis la vitesse au pas de temps suivant est réactualisée, cette procédure en deux temps permettant d'améliorer la précision sur la vitesse, le point faible de la méthode de Verlet de base. Ensuite on réitère jusqu'au dernier pas de temps final.

Le pas de temps Les équations du mouvement (Eq. II.1) sont intégrées numériquement en utilisant un pas de temps Δt choisi entre 0,5 et 2 fs pour permettre de résoudre les mouvements très rapides des atomes autour de leur position d'équilibre.

Les conditions aux limites périodiques Les conditions aux limites périodiques sont souvent utilisées pour s'affranchir des effets de bord. Elles consistent d'une part à répliquer les atomes répartis dans une boîte selon une, deux ou trois directions afin de décrire un fil, une couche ou un milieu infini. Cet artifice consiste à faire rentrer un atome sorti de la boîte de simulation par l'autre côté par l'intermédiaire de son image (voir Fig.II.2). D'autre part, on est alors amené à prendre en compte les images des atomes pour le calcul des interactions interatomiques.

L'ensemble thermodynamique Les simulations de dynamique moléculaire peuvent être effectuées dans l'ensemble microcanonique dit NVE (nombre d'atomes, volume et énergie constants), canonique dit NVT (nombre d'atomes, volume et température constants)

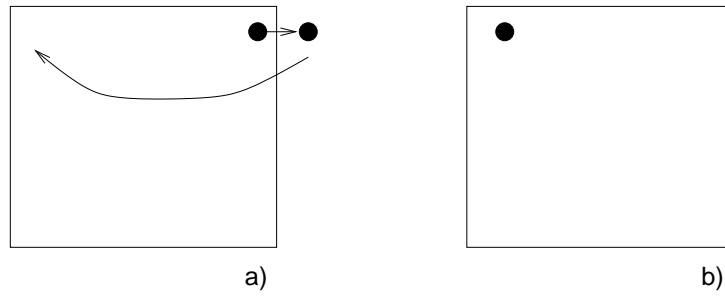


Figure II.2: Principe des conditions aux limites périodiques. L'atome qui sort de la boîte de simulation par la droite (a) est translaté (b) pour rester dans cette boîte.

ou dans l'ensemble isobare-isotherme dit NPT (nombre d'atomes, pression et température constants). J'ai implémenté les deux premiers ensembles dans MODYC. Par défaut, la résolution de l'équation de Newton nous place dans l'ensemble NVE. Ce type de simulation est utile par exemple pour tester la conservation de l'énergie du système lors du choix du pas de temps. Pour étudier des systèmes en fonction de la température, le cas le plus courant, une façon simple consiste à multiplier les vitesses, après chaque pas de temps, par un facteur correctif $\sqrt{T/T_c}$ où T désigne la température que l'on souhaite imposer au système, et T_c la température cinétique calculée à partir des vitesses :

$$T_c = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2(t)}{k_B N_f} \quad (\text{II.2})$$

où N_f est le nombre de degrés de liberté égal à $3N$ pour un système de N particules avec une énergie totale constante. Cette technique de réajustement des vitesses est nommée "velocity rescaling". Cette méthode simple permet d'introduire de la température dans le système, mais ne correspond pas à un ensemble canonique pur. Pour s'en approcher, d'autres méthodes plus rigoureuses ont été développées par Nosé et Hoover^{26,27}, Langevin²⁸ ou Berendsen²⁹. Elles sont basées sur l'ajout d'un degré de liberté dans l'équation de Newton, qui permet de simuler les échanges avec un bain thermique. La méthode de Nosé-Hoover est implémentée dans MODYC.

La Fig. II.3 présente un exemple de contrôle de la température cinétique autour d'une consigne de 1273 K, d'abord en velocity scaling pendant 4 ps pour équilibrer le système, puis en NVT pur. Les oscillations de la température sont le signe d'un échange avec un thermostat.

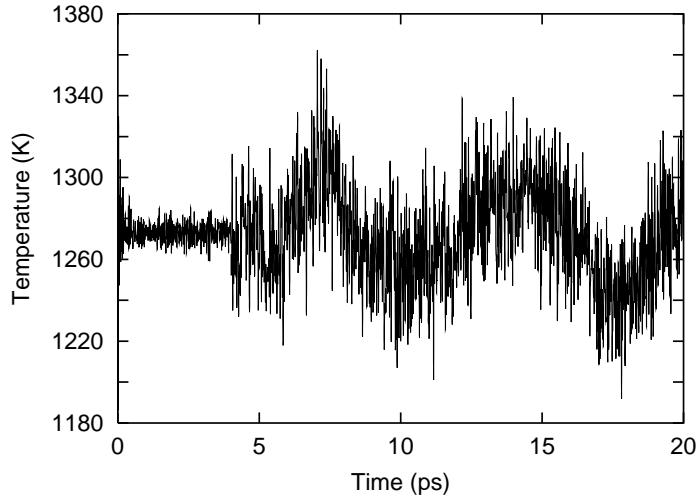


Figure II.3: Température cinétique du système en fonction du temps.

2.2 POTENTIELS INTERATOMIQUES EMPIRIQUES

En dynamique moléculaire classique, les forces contenues dans l'Eq.II.1 sont données par des potentiels interatomiques empiriques. Les principaux potentiels empiriques pour le silicium sont : le potentiel de Stillinger-Weber³⁰, le potentiel de Tersoff, par exemple dans sa troisième version³¹, le potentiel EDIP³² et le potentiel de Lenosky³³. J'ai incorporé ces 4 potentiels dans MODYC, en partant de routines disponibles via internet soit par les auteurs (cas de EDIP et Lenosky) soit dans des codes dont le source est disponible (cas de Stillinger-Weber et Tersoff). Chacun de ces potentiels se distingue par une formulation propre destinée à décrire au mieux les interactions entre atomes de silicium, ainsi que par une base de données particulière utilisée pour déterminer les paramètres du potentiel. Ainsi, le potentiel de Stillinger et Weber est composé d'un terme radial à 2 corps $v_{ij}^{(2)}$ qui décrit l'étirement de la liaison et d'un terme angulaire à 3 corps $v_{jik}^{(3)}$ qui contient la répulsion entre les liaisons :

$$V = \sum_{ij} v_{ij}^{(2)}(r_{ij}) + \sum_{jik} v_{jik}^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}), \quad (\text{II.3})$$

avec

$$v_{ij}^{(2)}(r_{ij}) = A \left(B r_{ij}^{-p} - r_{ij}^{-q} \right) \exp \left(\frac{1}{r_{ij} - a} \right) \quad (\text{II.4})$$

et

$$v_{jik}^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}) = \lambda \exp \left(\frac{\gamma}{r_{ij} - a} \right) \exp \left(\frac{\gamma}{r_{ik} - a} \right) \left(\cos \theta_{jik} + \frac{1}{3} \right)^2 \quad (\text{II.5})$$

où r_{ij} et r_{ik} sont les distances entre les atomes i et j et les atomes i et k respectivement, et θ_{jik} est l'angle entre les liaisons ij et ik . Les paramètres du potentiel (A , B , p , q , a , σ , λ , γ et κ) ont été ajustés sur les propriétés expérimentales du silicium diamant et de sa phase liquide et sont donnés en référence 30. Ce potentiel est le plus utilisé pour étudier le silicium³⁴⁻³⁷, même s'il possède certaines limites comme une mauvaise description de l'état amorphe^{38,39}. Une modification du potentiel Stillinger-Weber, qui sera dénommée dans la suite SW115, a été développée récemment par Albenze et Clancy⁴⁰ afin d'améliorer la description de l'amorphe par un renforcement de 15 % de la valeur de λ (terme angulaire). Par ailleurs, le potentiel de Stillinger-Weber est le seul pour lequel des paramètres pour les interactions Si-B et B-B ont été déterminées⁴¹⁻⁴³, ce qui a permis l'étude de la diffusion du B présentée dans la partie suivante.

Le potentiel de Tersoff possède trois formulations légèrement différentes^{44,45,31}, la dernière, dans sa version simplifiée est implémentée dans MODYC. Le potentiel de Tersoff n'impose plus l'angle $\cos \theta_{jik} = \frac{1}{3}$ aussi radicalement que le potentiel de Stillinger-Weber, ce qui le rend par exemple plus apte à décrire la phase amorphe du silicium. Les paramètres du potentiel sont ajustés sur les énergies de cohésion de différentes phases du silicium, ainsi que sur des constantes élastiques. Les surfaces sont plus ou moins bien reconstruites, suivant la version du potentiel. La température de fusion que le potentiel prédit est beaucoup plus élevée que la valeur expérimentale : 2400 K⁴⁶ contre 1685 K. Une remise à l'échelle des températures est parfois utilisée pour pallier cet inconvénient⁴⁷, sans que sa validité ne soit clairement établie.

Le potentiel EDIP (Environment-Dependent Interatomic Potential)^{32,48,49} est une extension du potentiel de Stillinger-Weber. Il est basé sur le calcul de la coordination de l'atome (4, 3, ...), ce qui permet de décrire son environnement local, et de mieux l'adapter aux situations où il n'est pas, comme dans le Si massif, égal à 4. Les paramètres du potentiel sont ajustés sur des calculs *ab initio*. Le potentiel EDIP décrit mieux les défauts, comme les intersticiels de Si et la reconstruction autour de certaines dislocations³³. Sa formulation le rend potentiellement plus apte à reconstruire correctement les surfaces, même si aucune étude à ce sujet n'a été publiée à ce jour.

Enfin le potentiel de Lenosky³³ est construit selon une méthode *embedded-atom* modifiée : le terme de paire est de type *embedded*, le terme angulaire est d'inspiration Stillinger-Weber. Ce potentiel a été développé pour décrire les énergies de formation et géométries des précipités d'intersticiels et il rend bien compte des différentes coordinations, du dimère

à des cristaux de coordinations 12. Les très nombreux paramètres du potentiel (≈ 50) sont ajustés sur des calculs *ab initio*. Les résultats obtenus sont légèrement supérieurs à ceux donnés EDIP, par exemple en matière de dislocations.

2.3 GESTION DES VOISINS ET PARALLÉLISATION

Lors d'une simulation en dynamique moléculaire, on est amené à chaque pas de temps à calculer pour chaque atome i la force exercée par ses voisins :

```
Pour  $i = 1$ , Nombre d'atomes
|   Pour  $j =$  Premier voisin de  $i$ , Dernier voisin de  $i$ 
|   |   Calcul de la force entre  $i$  et  $j$ 
|   Fin boucle sur  $j$ 
Fin boucle sur  $i$ 
```

Il est donc nécessaire de connaître la liste des voisins de chaque atome, sachant qu'un voisin est un atome qui se situe à une distance inférieure au rayon de coupure r_c du potentiel interatomique. J'ai implémenté dans MODYC successivement deux techniques pour gérer le voisinage : la liste de Verlet dans la version initiale de MODYC, puis le découpage en cellules durant l'été 2006, en me basant sur les routines de Goedecker⁵⁰.

Pour construire une liste de Verlet, on cherche pour chaque atome i les atomes j qui sont à moins de $r_c + r_s$, r_s étant un rayon de peau (voir Fig. II.4):

```
Pour  $i = 1$ , Nombre d'atomes
|   Pour  $j = 1$ , Nombre d'atomes
|   |   Calcul de la distance entre  $i$  et  $j$ 
|   |   Si cette distance est inférieure à  $r_c + r_s$  alors  $j$  est un voisin de  $i$ 
|   Fin boucle sur  $j$ 
Fin boucle sur  $i$ 
```

Cette procédure demande une double boucle sur les voisins, et dépend donc du nombre

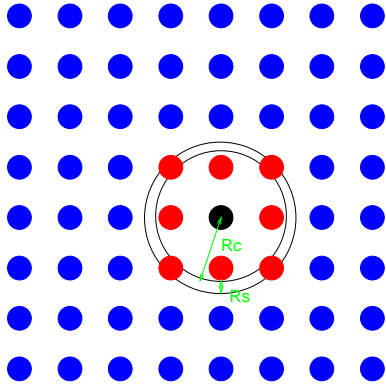


Figure II.4: Liste de voisins de type Verlet avec épaisseur de peau. Les atomes rouges sont dans la liste de Verlet de l'atome noir.

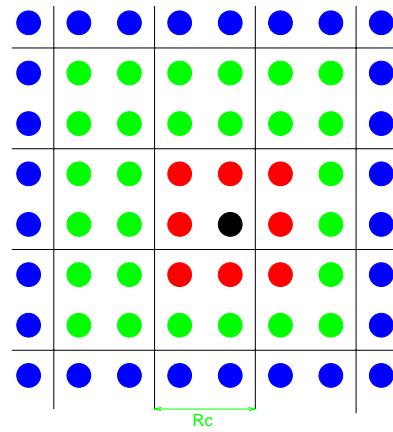


Figure II.5: Schéma par cellule. Les atomes rouges sont les voisins de l'atome noir, les atomes verts appartiennent à des cellules voisines de celle de l'atome noir.

d'atomes par une relation en $O(N^2)$. C'est donc une étape très coûteuse en temps de calcul, d'autant plus que le nombre d'atomes est grand. L'utilisation de la peau de rayon r_s est un premier pas pour réduire ce temps de calcul. En effet, au lieu de refaire la double boucle à chaque pas de temps, on va calculer le déplacement maximum d'un atome et s'il est supérieur à l'épaisseur de peau r_s alors seulement la liste de voisins est remise à jour. Suivant les systèmes étudiés, cela peut donc permettre de faire très peu de remises à jour de la liste de voisins et donc de gagner du temps de calcul.

Une autre solution consiste à découper le système atomique en cellules de côté égal au rayon de coupure r_c . Dans ce cas, il n'y a pas de liste de voisins, mais la double boucle permettant de calculer les forces entre les atomes i et j est simplement faite pour j dans les cellules voisines (atomes verts et rouges de la Fig. II.5).

```

Pour i = 1, Nombre d'atomes
|   Pour j dans l'une des cellules voisines de i
|   |   Calcul de la force entre i et j
|   Fin boucle sur j
Fin boucle sur i

```

On évite ainsi la coûteuse double boucle nécessaire pour déterminer la liste de voisins. Les deux méthodes ont été utilisées pour simuler avec le potentiel EDIP le recuit d'une boîte de silicium présentant deux surfaces suivant un des axes, pendant 10000 pas de

temps à 1000 K. Le résultat est présenté sur les Figs. II.6 et II.7. A 1000 atomes, le gain est d'environ 2 et il monte à 5 à 4096 atomes. La différence devrait augmenter encore pour des systèmes plus gros. La taille mémoire du programme diminue également avec l'approche d'ordre N , comme le montre la Fig. II.7. Le gain est moins spectaculaire, mais il est quand même de 2.7 pour la boîte de 4096 atomes.

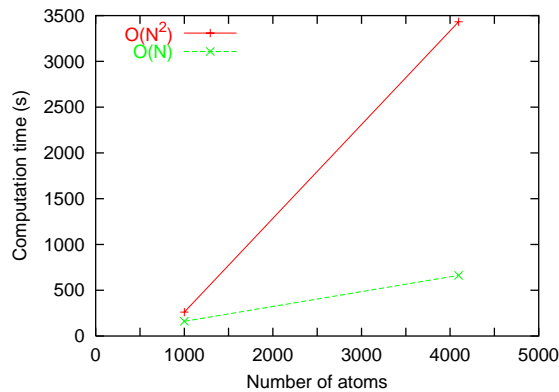


Figure II.6: Temps de calcul en fonction du nombre d'atomes pour les approches d'ordre N et d'ordre N^2 .

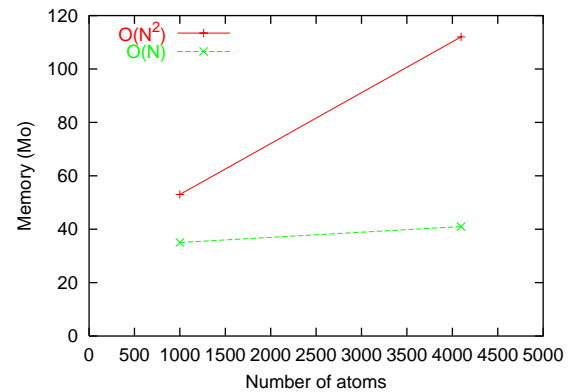


Figure II.7: Taille mémoire en fonction du nombre d'atomes pour les approches d'ordre N et d'ordre N^2 .

L'approche d'ordre N est aujourd'hui privilégiée, d'autant que ce découpage en n_{cell} cellules permet de procéder à la parallélisation du processus en répartissant à chaque pas de temps le calcul des forces entre n_{th} tâches, chaque tâche s'occupant donc de $n_{\text{cell}}/n_{\text{th}}$ cellules. Pour cela, l'utilisation de la librairie de parallélisation OpenMP est tout à fait indiquée. Cette approche développée par Goedecker⁵⁰ pour certains potentiels interatomiques (Lenosky et EDIP) a été intégrée et étendue aux autres potentiels dans MODYC. La Fig. II.8 présente les résultats obtenus pour les différents potentiels sur un calcul test effectué sur une boîte de 100 000 atomes présentant deux surfaces dans une direction et chauffée pendant 100 000 pas de temps de 1 fs à une température de 1000 K imposée par remise à l'échelle des vitesses. Les calculs ont été effectués sur un ordinateur Sun Fire X4600 équipé de 8 processeurs opteron AMD double cœur, soient 16 tâches possibles. La nature différente de chaque potentiel donne lieu à une implémentation différente, d'où des écarts dans le temps de calcul. Toutefois, pour tous ces potentiels on observe une diminution escomptée du temps de calcul lorsque le nombre de tâches augmente, suivie d'une saturation voire d'une augmentation du temps de calcul par exemple pour Tersoff et EDIP avec 16 tâches. Ce comportement est dû à la partie de communication et aux conflits d'accès qui deviennent le facteur limitant à grand nombre de tâches. La répartition en 4 tâches pour des calculs avec Tersoff et EDIP, 8 tâches pour Stillinger-Weber et

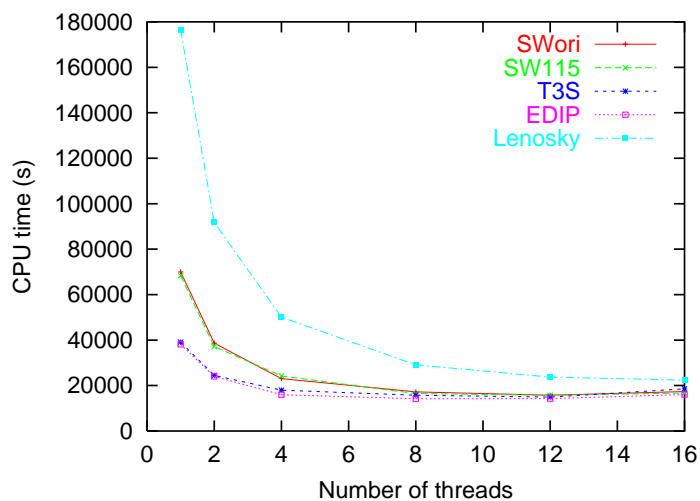


Figure II.8: Temps de calcul en fonction du nombre de tâches pour les différents potentiels décrivant le Si : Stillinger-Weber dans sa paramétrisation originale (SWori), et modifiée (SW115), Tersoff (T3S), EDIP et Lenosky.

le maximum (16) pour Lenosky semble optimale du point de vue du temps de calcul pour l'exemple testé. Toutefois, dans le cas de Stillinger-Weber par exemple, le gain apporté par le passage de 4 à 8 tâches est nettement moins important que le gain de 1 à 2 ou 2 à 4 tâches, ce qui fait qu'il apparaît plus avantageux de faire tourner 2 processus de 4 tâches qu'un seul de 8 tâches. La stratégie retenue a donc été d'utiliser les 8 processeurs double cœur pour exécuter 4 processus répartis sur 4 tâches.

3 Première application : la diffusion du bore

Le schéma classiquement utilisé dans les simulateurs de procédés continus pour décrire la diffusion du bore est le suivant : le bore est immobile et actif au sens du dopage lorsqu'il est en site substitutionnel, et devient mobile mais inactif lorsqu'un interstitiel de silicium vient interagir avec lui pour le positionner en site interstitiel. De ce schéma dépend donc au final la profondeur de jonction (nombre de passages du dopant en site interstitiel et distance parcourue à chaque fois) et le taux d'activation (proportion de dopants en site substitutionnel). L'objectif de ce travail est, d'une part de voir si ce schéma classique de la diffusion du bore est obtenu par la méthode présentée dans la partie précédente, et d'autre part de tester si cette méthode est suffisamment précise pour déterminer certains paramètres comme la longueur de migration du bore, connue à

l'heure actuelle par l'expérience. Il nous semblait en effet très important d'estimer à quel point ces simulations atomistiques pouvaient être fiables pour étudier d'autres problèmes plus complexes.

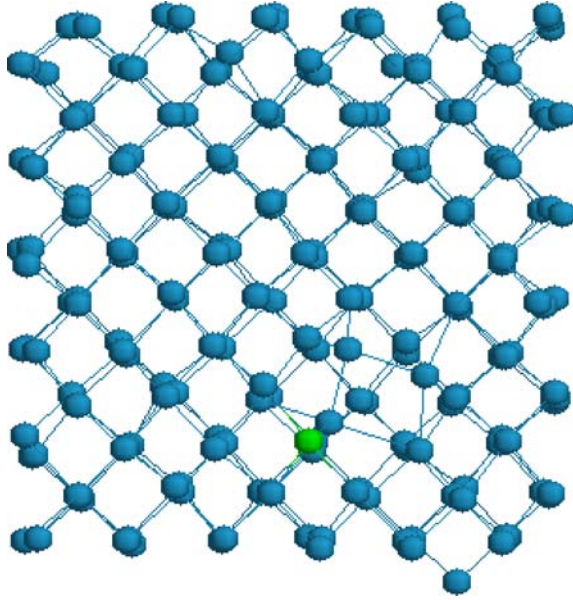


Figure II.9: Atome de bore (vert) à proximité d'un défaut interstitiel étendu dans une cellule de 216 atomes de silicium (bleu).

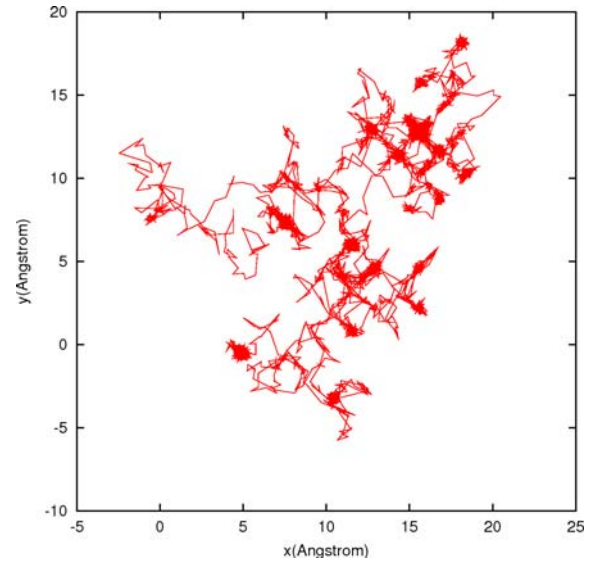


Figure II.10: Projection 2D du trajet au cours du temps d'un atome de bore dans une boîte de silicium.

Une cellule de simulation cubique ($16 \times 16 \times 16 \text{ \AA}^3$) et périodisée dans les 3 directions a donc été construite, avec par exemple 216 atomes de silicium et un atome de bore (voir Fig. II.9). Cette cellule de simulation est ensuite entrée dans MODYC et l'évolution au cours du temps du système est étudiée grâce au potentiel de Stillinger-Weber et les paramètres de Rasband⁴¹ pour les interactions Si-B. La Fig. II.10 représente un exemple de trajet de l'atome de bore de la Fig. II.9. Ce trajet est formé d'oscillations autour de certains sites du réseau alternés avec des sauts vers d'autres positions. Le déplacement au carré $(r_B(t) - r_B(0))^2$ du bore placé initialement dans un des interstices du cristal est représenté sur la Fig. II.11. Il présente une succession de plateaux où le bore est immobile et de variations importantes où le bore diffuse. La Fig. II.12 est un zoom du déplacement carré autour d'une période de mobilité vers 1.6 ns. Les positions des atomes sont également reportées sur cette figure, et aident à comprendre le processus de diffusion au niveau atomique :

- en I, le bore est en site substitutionnel et un défaut interstitiel de silicium s'approche
- en III, le bore est en site interstitiel

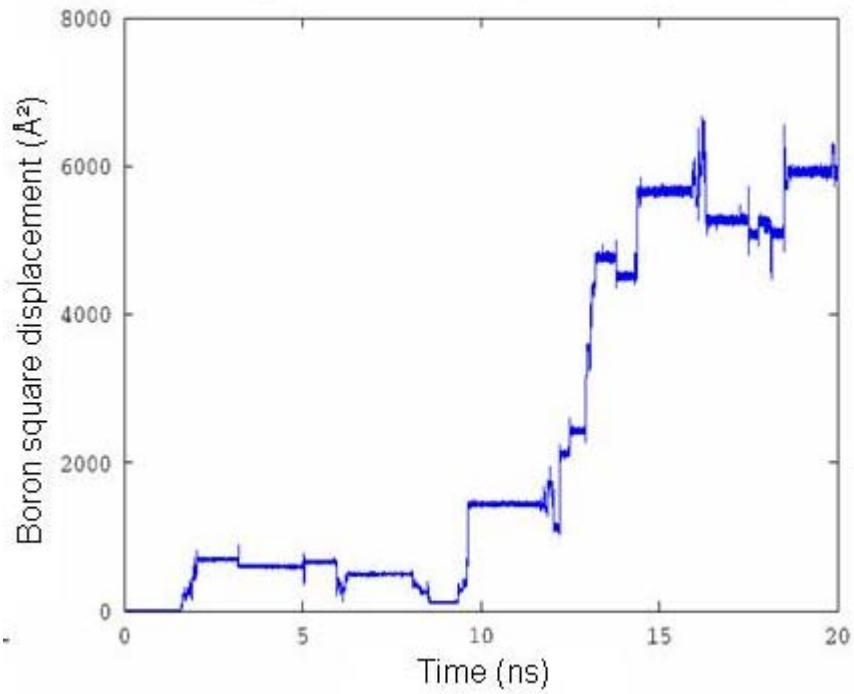


Figure II.11: Déplacement carré du bore au cours du temps.

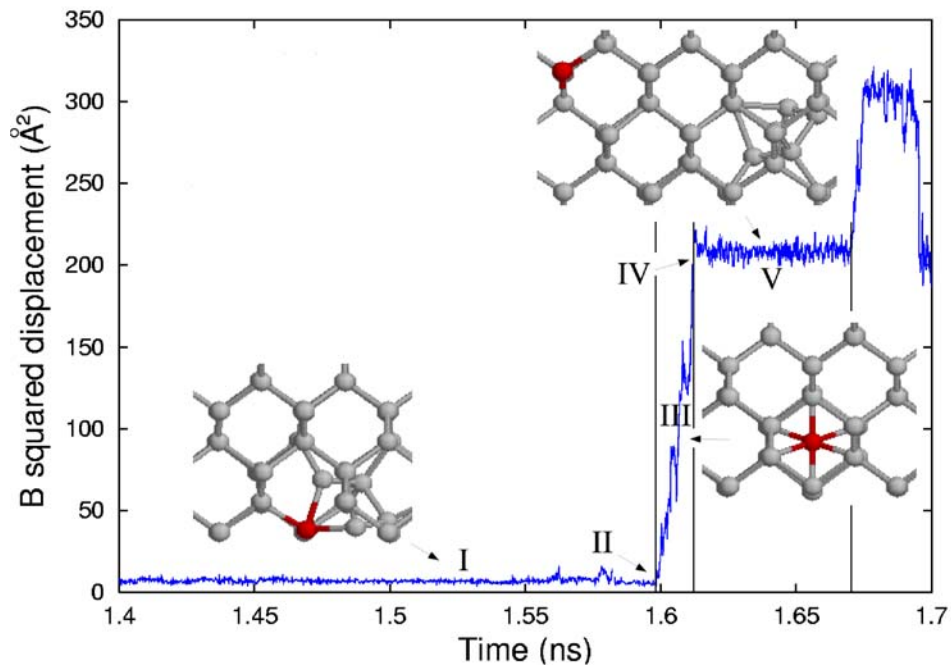


Figure II.12: Zoom de la Fig. II.11 avant, pendant et après une période de mobilité et représentation des atomes autour du bore (atome rouge).

- en V, le bore est revenu en site substitutionnel, et un défaut interstitiel de silicium s'éloigne

On retrouve donc bien avec cette simulation atomistique le schéma classique de la diffusion du bore : un silicium interstitiel vient interagir avec un bore en site substitutionnel immobile, puis le bore se retrouve en site interstitiel et diffuse, avant que le mécanisme inverse ne conduise à l'immobilisation du bore sur un site substitutionnel accompagné de la formation d'un interstitiel de silicium.

Comme la dynamique moléculaire donne le mécanisme attendu de couplage bore-interstitiel, nous avons ensuite calculé une grandeur qui le caractérise, la longueur de migration du bore. Cette longueur de migration a été déterminée en calculant la distance parcourue par le bore lors de ses périodes de mobilité, et en faisant une moyenne sur un grand nombre d'évènements de migration (jusqu'à une centaine). Cette démarche est répétée à plusieurs températures, et le résultat est donné sur la Fig. II.13. On obtient un

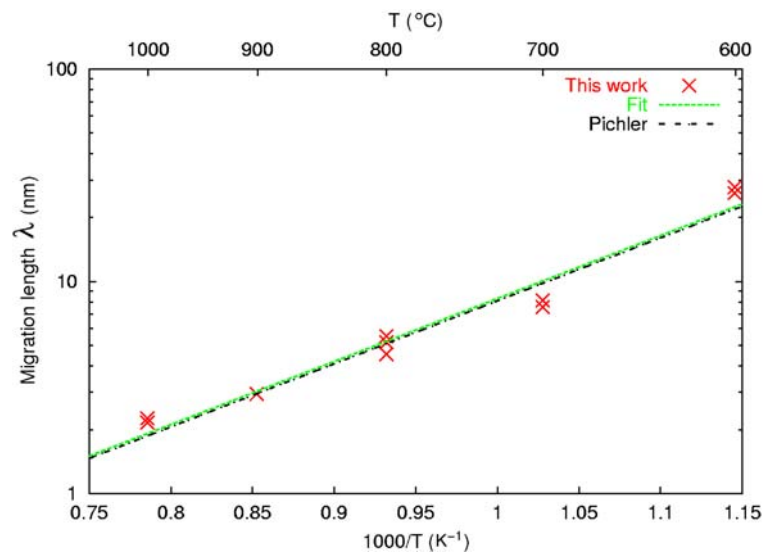


Figure II.13: Longueur de migration du bore calculée par dynamique moléculaire (croix rouges) et déduite des mesures (ligne noire). Un ajustement des calculs est également présenté en vert.

excellent accord entre les calculs atomistiques et l'ajustement sur des résultats déduits de l'expérience.

Ceci valide donc l'approche et ouvre la voie à des calculs similaires sur des matériaux où ni le mécanisme ni la longueur de migration ne sont connus, comme par exemple le

silicium amorphe (voir partie suivante). Ces travaux ont été publiés dans *Europhysics Letters*⁵¹, et sont reportés en annexe du manuscrit.

4 Seconde application : la recristallisation du silicium

L'intérêt porté au silicium préamorphisé a déjà été évoqué dans le premier chapitre. Le procédé de préamorphisation permet de réduire la profondeur de pénétration du bore pour former des jonctions ultraminces. Un recuit est ensuite nécessaire pour retrouver la structure cristalline du silicium. La première possibilité est de recuire à très basse température, juste assez pour faire recristalliser le silicium amorphe mais pas assez pour faire diffuser le bore (Fig. II.14). On a alors une épitaxie en phase solide (SPE pour Solid Phase Epitaxy en anglais) du silicium. La deuxième possibilité est de chauffer par exemple avec un laser à des températures voisines du point de fusion de l'amorphe (Fig. II.15). Dans ce cas, le retour à l'état cristallin se fait via une épitaxie en phase liquide (LPE pour liquid phase epitaxy). Le coefficient de diffusion du bore étant très élevé dans la couche fondue, on obtient un profil idéalement carré et dont la profondeur est égale à celle de la zone amorphe.

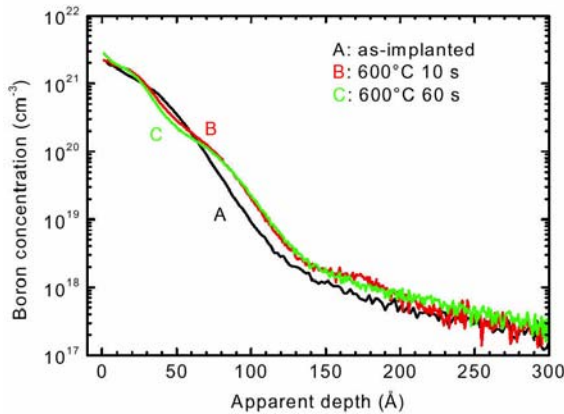


Figure II.14: Profil de bore avant/après recuit à basse température. Extrait de la référence 52.

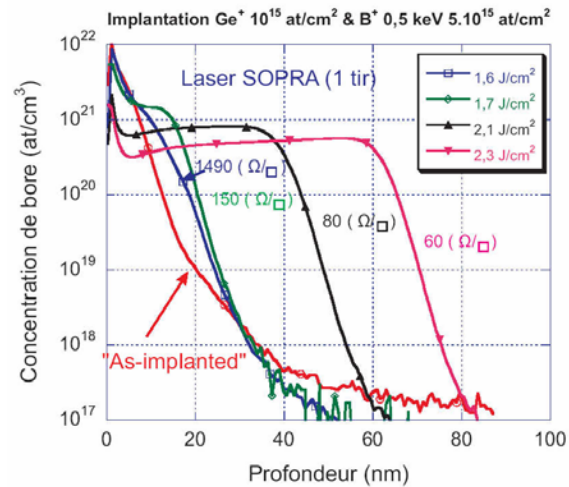


Figure II.15: Profil de bore avant/après recuit laser. Extrait de la référence 53.

La vitesse de SPE v_{SPE} de l'amorphe non dopé est très bien connue puisqu'elle a

été mesurée dans les années 80 par interférométrie, et Olson et Roth⁵⁴ ont obtenu une loi d'Arrhénius sur une très large gamme de température à partir des différents points expérimentaux :

$$v_{\text{SPE}} = 3.1 \times 10^{15} \exp(-2.68\text{eV}/kT)\text{nm/s} \quad (\text{II.6})$$

Toutefois, en présence d'impuretés, la vitesse est beaucoup moins maîtrisée à cause de phénomènes d'accélération, ralentissement, compensation et même d'hystérésis (voir Figs. II.16 et II.17). Notre but à terme est de parvenir à déterminer cette vitesse dans le cas extrinsèque. Mais pour cela il nous faut d'abord déterminer si les simulations atomistiques sont en bon accord avec les expériences dans le cas intrinsèque.

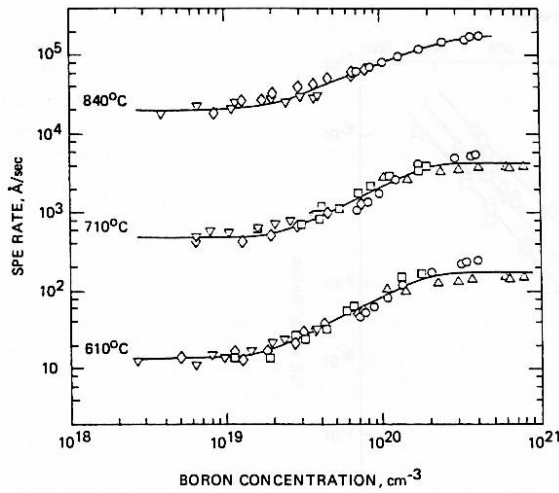


Figure II.16: Vitesse de recristallisation en présence de bore. Extrait de la référence 54.

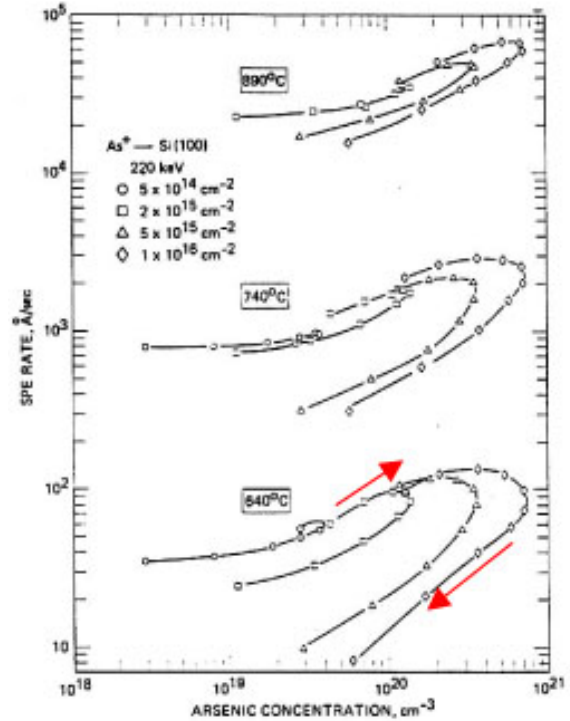


Figure II.17: Hystérésis dans la courbe de dépendance de la vitesse de SPE en fonction de la concentration d'arsenic. Extrait de la référence 54.

Pour cela, nous avons construit un empilement d'atomes de silicium amorphe sur cristal (voir Fig. II.18) en générant la structure amorphe par un algorithme de réarrangement des liaisons⁵⁵, avant de la "coller" sur un fond cristallin. La surface côté amorphe est laissée libre pour permettre des changements de volume. Sur la surface côté cristal, les atomes de silicium sont figés sur deux plans atomiques pour contraindre la structure

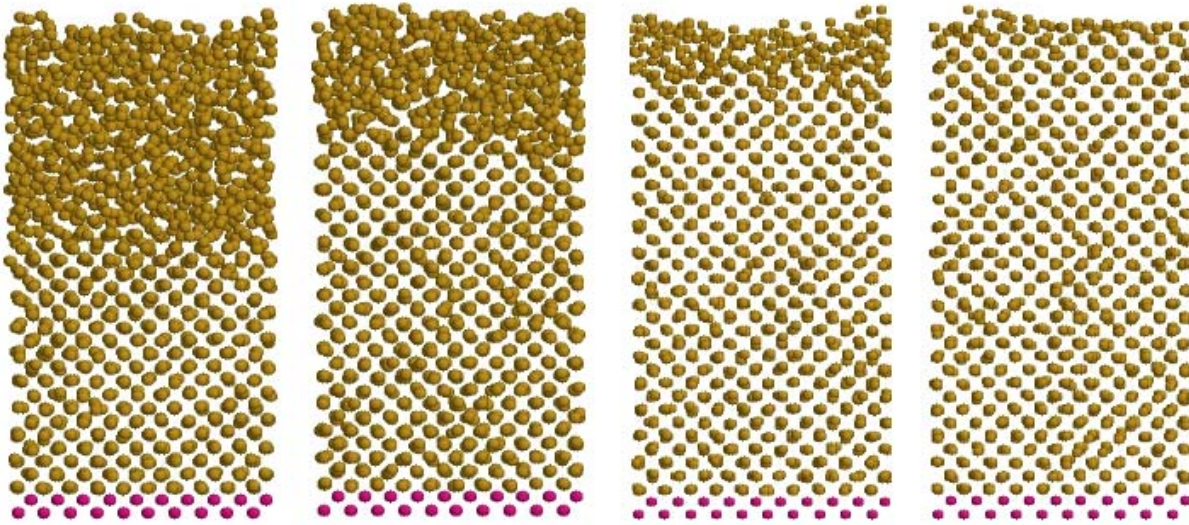


Figure II.18: Evolution de l'empilement amorphe sur cristal. De gauche à droite : système initial, puis après recuit de 100, 200 et 500 ps à 1273 K. 1905 atomes.

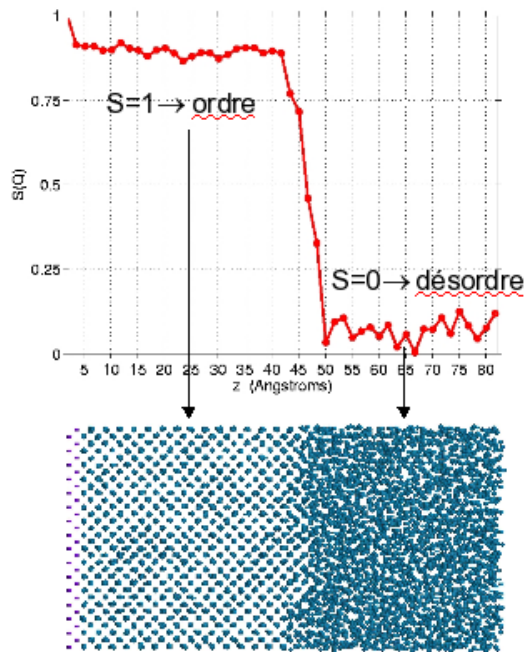


Figure II.19: Facteur de structure par couche. Une valeur à 1 indique un matériau ordonné, une valeur à 0 indique un matériau désordonné, ainsi qu'on peut s'en rendre compte en comparant le facteur de structure aux positions atomiques. Empilement de 8034 atomes.

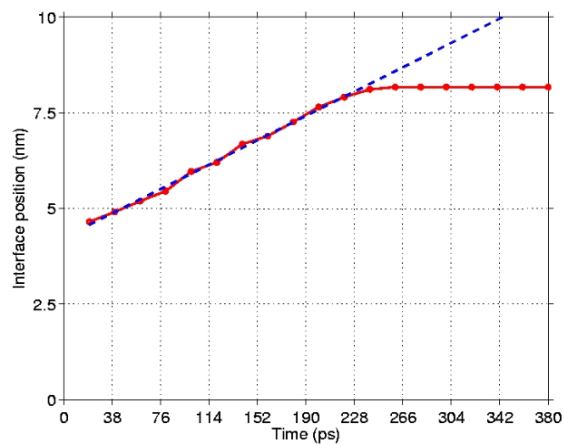


Figure II.20: Position de l'interface entre l'amorphe et le cristal en fonction du temps de recuit.

cristal diamant et se rapprocher ainsi d'un matériau semi-infini. L'empilement est ensuite recuit par dynamique moléculaire, et une réorganisation de la couche désordonnée est obtenue lorsque le recuit se prolonge (voir Fig. II.18). Une exploitation quantitative de ces simulations est ensuite menée pour calculer la vitesse de recristallisation. Dans ce but, un facteur de structure par couche est déterminé (voir Fig. II.19), en suivant la méthode utilisée par Mattoni et Colombo⁵⁶. Ce facteur prend une valeur égale à 1 dans un matériau ordonné et à 0 dans un matériau désordonné. Le passage à 0.5 permet de repérer l'interface, dont la position au cours du temps est représentée sur la Fig. II.20. Au début du recuit, l'interface se déplace avec une vitesse constante (pente de la droite) puis le régime sature lorsque la recristallisation est complète. La pente est extraite de cette manière pour différentes températures, et pour 5 potentiels interatomiques.

Le résultat de cette étude systématique est présenté sur la Fig. II.21. Notons tout d'abord que les gammes de températures diffèrent en fonction du potentiel. Par exemple, la recristallisation est très lente avec le potentiel de Tersoff, ce qui à l'époque où le calcul présenté a été réalisé nous limitait à environ 3×10^{-6} nm/ps (3 mois de calcul), et donc ≈ 1450 -1500 K. Par contre, comme la température de fusion avec le potentiel de Tersoff

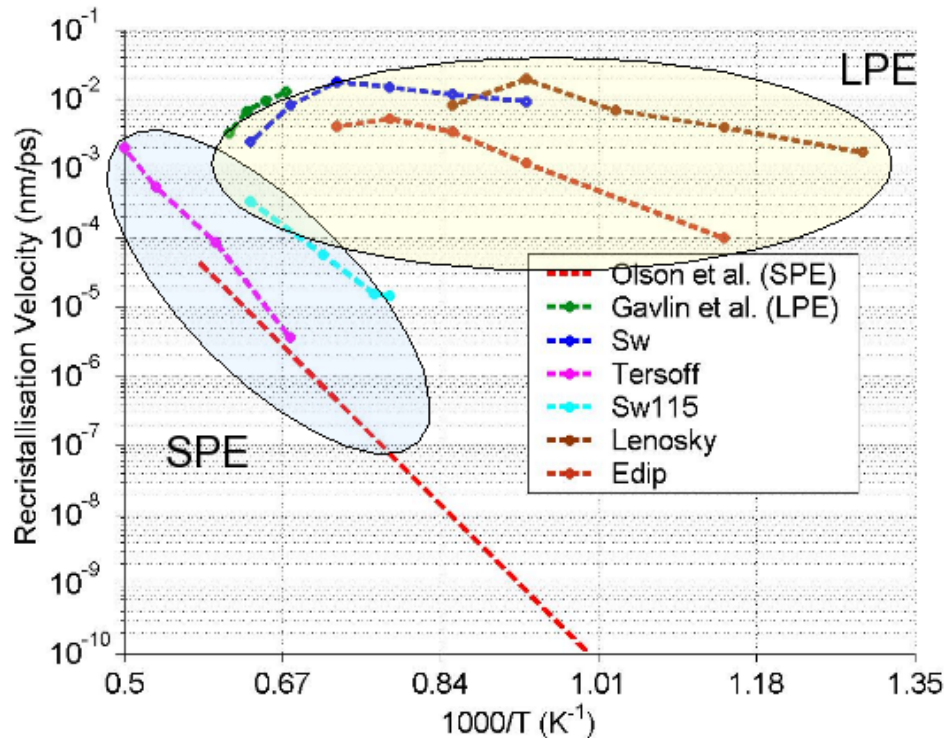


Figure II.21: Vitesse de recristallisation de l'amorphe pour différents potentiels interatomiques du silicium, pour une expérience de SPE⁵⁴ et une expérience de LPE⁵⁷.

est très élevée (≈ 2400 K), les calculs ont été menés très haut en température (jusqu'à 2000 K).

Les vitesses de recristallisation dépendent fortement du potentiel interatomique utilisé et semblent a priori disparates. Mais un examen plus poussé permet de les classer en deux groupes. Dans le premier groupe (potentiels de Tersoff et SW115), les vitesses obtenues sont plus faibles, suivent une loi d'Arrhénius et sont proches des mesures d'Olson et Roth⁵⁴. Dans le second groupe (potentiels de Stillinger-Weber, Lenosky et EDIP), la vitesse de recristallisation est beaucoup plus élevée (voir Fig. II.21). Elle ne suit pas une loi d'Arrhénius mais elle présente un maximum avant de diminuer à très haute température, région dans laquelle les simulations sont en accord avec les points expérimentaux de Galvin et ses collaborateurs⁵⁷. Ces expériences mesurent la vitesse de recristallisation du silicium liquéfié par un laser pulsé.

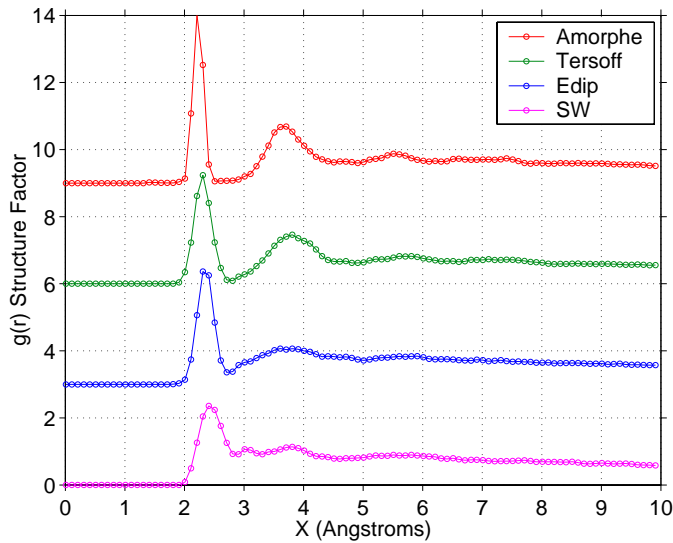


Figure II.22: Facteurs de structure (les courbes sont décalées verticalement pour une meilleure lisibilité) de la zone désordonnée initiale (Amorphe) et au cours du recuit avec les potentiel de Tersoff, EDIP et Stillinger-Weber (SW).

Par ailleurs, cette répartition en deux groupes se retrouve également si on regarde le facteur de structure (Fig. II.22) et la distribution angulaire (Fig. II.23) de la partie désordonnée. Le facteur de structure renseigne sur la distribution radiale des atomes. Le facteur de structure d'un cristal est formé des pics de premiers (2.3 Å), seconds (3.8 Å), troisièmes (4.5 Å), ... voisins. Dans l'amorphe (voir Fig. II.22), seuls les pics de premiers et seconds voisins se détachent nettement, avec un retour à 0 entre les deux pics. Au-delà, le désordre de l'amorphe fait que le facteur de structure se stabilise autour de

1. Après recuit avec le potentiel de Tersoff, on garde effectivement les deux premiers pics avec un retour à 0 entre les deux. Par contre le recuit avec les potentiels de EDIP et de Stillinger-Weber fait quasiment disparaître le pic de seconds voisins, et le premier pic n'est plus suivi d'un retour à 0 : c'est le facteur de structure d'un liquide.

Quant à la distribution angulaire (Fig. II.23) qui renseigne sur l'angle moyen, elle est piquée à 109.5° dans le cristal. Le pic est élargi de ± 10 à 20° dans l'amorphe (voir Fig. II.23), signe des distorsions des liaisons. La largeur de la distribution angulaire reste comparable après un recuit avec Tersoff, mais augmente considérablement après un recuit avec Stillinger-Weber ou EDIP pour atteindre les caractéristiques d'un liquide.

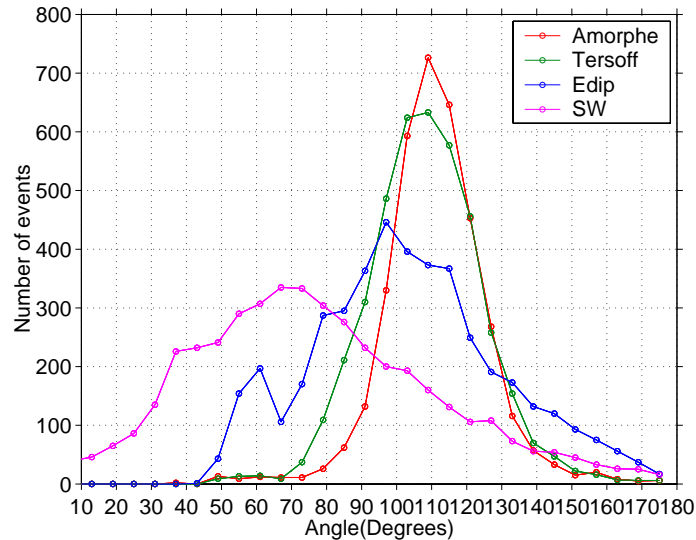


Figure II.23: Distribution angulaire de la zone désordonnée initiale (Amorphe) et au cours du recuit avec les potentiels de Tersoff, EDIP et Stillinger-Weber (SW).

Les allures et niveaux des vitesses de recristallisation en fonction de la température, le facteur de structure et la distribution angulaire permettent donc d'affirmer que :

- le potentiel de Tersoff et le potentiel SW115 sont adaptés à la description de la SPE : les vitesses sont en accord avec la loi expérimentale⁵⁴ et la vérification de la structure en cours de recuit montre que le potentiel est capable de conserver à l'amorphe ses caractéristiques (facteur de structure et distribution angulaire). Le potentiel de Tersoff en particulier donne un excellent accord des vitesses de recristallisation avec l'expérience, même si le problème de sa température de fusion bien supérieure à l'expérience laisse toujours planer le doute sur sa fiabilité.

- les potentiels de Stillinger-Weber, EDIP et Lenosky quant à eux sont plus enclins à décrire la LPE du silicium : les vitesses sont beaucoup plus élevées et ne suivent pas une loi d'Arrhénius, et dès la phase d'équilibration l'amorphe est transformé en liquide. Le potentiel de Stillinger-Weber en particulier présente le meilleur accord avec les vitesses de recristallisation expérimentales⁵⁷.

Ces travaux ont été publiés dans *Journal of Applied Physics*⁵⁸, et sont reportés en annexe du manuscrit.

5 Conclusion

Les études à l'échelle atomiques présentées dans ce second chapitre ont été réalisées avec la méthode de la dynamique moléculaire en potentiels interatomiques empiriques. L'outil développé a été utilisé pour déterminer certains paramètres intervenant dans les simulateurs de procédés technologiques standards, comme la longueur de migration du bore ou la vitesse de recristallisation du silicium. En ce qui concerne la migration du bore assistée par interstitiel, le mécanisme obtenu avec le potentiel de Stillinger-Weber a été analysé. Un phénomène de kick-out est obtenu. La longueur de migration du bore en site interstitiel est ensuite systématiquement calculée et le résultat est en parfait accord avec d'autres déterminations d'après expérience. La recristallisation du silicium est par ailleurs étudiée dans le but initial de décrire la SPE. Après avoir construit avec soin un amorphe de référence, différents potentiels interatomiques sont testés en extrayant la vitesse de recristallisation en fonction de la température. L'analyse des résultats obtenus, tant en matière de vitesse de recristallisation qu'en ce qui concerne la structure du matériau au cours du recuit, a permis de classer les potentiels utilisés en 2 catégories : ceux qui sont adaptés pour décrire la SPE comme le potentiel de Tersoff, et ceux qui vont par contre décrire une LPE comme le potentiel de Stillinger-Weber. Dans les deux cas, l'accord entre la vitesse de recristallisation obtenue par dynamique moléculaire et l'expérience est très bon.

Ces résultats montrent à mon sens que la dynamique moléculaire empirique est l'outil de l'avenir pour l'étude des procédés technologiques. Cette méthode concilie l'aspect atomique, la rapidité de résolution et la taille importante des systèmes tout en accédant

à une prédictivité (parfois) inespérée. Cette méthode, couplée à des simulateurs continus par le transfert de paramètres, permettra de consolider la TCAD en évitant des expérimentations qui sont de moins en moins possibles, notamment en raison de leur coût.

Conclusion et perspectives

Conclusion

Les travaux présentés dans ce manuscrit portent sur la simulation de la formation des jonctions p^+/n des transistors MOS. Les méthodes utilisées vont du continu à l'échelle atomique. Cette activité a porté dans un premier temps sur les défauts étendus. Différents modèles, auxquelles j'ai contribué soit totalement soit partiellement, ont été testés sur des expériences et implémentés dans des outils de simulation de procédés technologiques. La description de la diffusion transitoire accélérée du bore, avec ou sans préamorphisation, a ainsi été rendue possible. En parallèle au début, puis quasi exclusivement aujourd'hui, j'ai développé un code de dynamique moléculaire dévoué au silicium dopé. Une première utilisation de cette méthode a porté sur la diffusion du bore dans le silicium, étude où la prédictivité de la méthode s'est montrée tout à fait encourageante. Dans un second temps, c'est la recristallisation du silicium qui a été modélisée, ce qui m'a conduit notamment à classer les potentiels interatomiques les plus courants pour le silicium selon leur aptitude à décrire l'épitaxie en phase solide ou en phase liquide.

Perspectives à court terme

L'évolution de la microélectronique vers des dispositifs toujours plus petits obtenus avec des technologies toujours plus complexes m'avait incitée à prendre la voie des simulations à l'échelle atomique. Les premières études très prometteuses sur la diffusion du bore et la recristallisation du silicium m'incitent à poursuivre cette voie à l'avenir. Plusieurs projets me semblent intéressants pour des applications en microélectronique tout en étant

accessibles par la technique de la dynamique moléculaire qui s'est montrée bien adaptée aux études technologiques à l'échelle atomique. Tout d'abord, à court terme, deux axes se profilent dans la continuité des études sur la recristallisation. Ce sont :

L'étude de l'effet des dopants sur la recristallisation du silicium

Maintenant que la compréhension des comportements des différents potentiels est à peu près claire dans le cas du Si intrinsèque, l'étape suivante est d'étudier l'impact des dopants. Ce projet à court terme (si court qu'il est déjà en cours...) repose sur l'existence de paramètres pour les interactions Si-dopant. Pour le bore, il existe 2 jeux de paramètres pour le potentiel de Stillinger-Weber^{41,42}, ce qui va nous permettre facilement d'étudier l'impact du bore sur la vitesse de LPE. Les Figs. C.1 et C.2 montrent des résultats préliminaires sur des petites cellules de simulation de 2000 atomes avec les deux jeux de paramètres. Des différences apparaissent, elles seront étudiées et permettront peut-être de sélectionner l'une ou l'autre paramétrisation. En ce qui concerne l'impact du bore sur

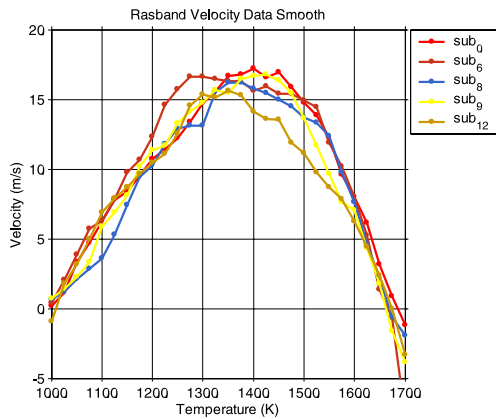


Figure C.1: Vitesse de LPE d'un empilement l-Si/c-Si de 2000 atomes dont 0 à 12 B. Paramètres de Rasband et al.⁴¹

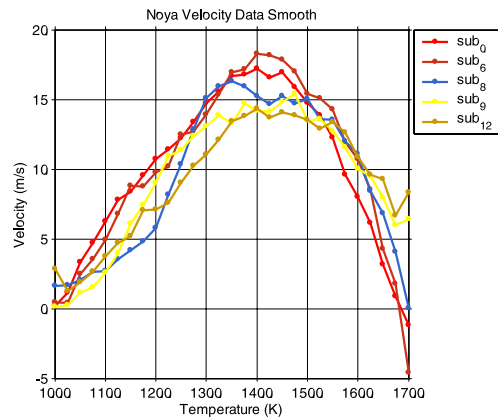


Figure C.2: Vitesse de LPE d'un empilement l-Si/c-Si de 2000 atomes dont 0 à 12 B. Paramètres de Noya et al.⁴²

la SPE, i. e. avec le potentiel de Tersoff, nous venons de découvrir dans la littérature⁵⁹ un jeu de paramètres pour le bore un peu particulier, puisqu'il est basé essentiellement sur l'utilisation des paramètres des interactions Si-C, avec en plus une prise en compte de la concentration de chaque espèce autour de deux atomes en interaction. Il est prévu de tester cette paramétrisation.

Pour aller plus loin, c'est-à-dire étudier l'impact d'autres dopants sur la SPE et la LPE, il nous faudra développer nos propres jeux de paramètres probablement en collaborant avec des physiciens familiers des méthodes *ab initio*. C'est une activité qui peut-être assez ingrate (longue et pas très exotique), elle est donc repoussée à plus long terme. Elle nous permettrait toutefois d'augmenter notre champ de simulation, déjà bien développé grâce à la famille de potentiels interatomiques intégrés dans MODYC.

L'étude des effets d'orientation et de contrainte sur la recristallisation des dispositifs réels

L'utilisation de la technique d'implantation amorphisante suivie d'un recuit de recristallisation pose certains problèmes spécifiques en situation réelle. Ces problèmes proviennent de la géométrie et de l'environnement de la zone amorphisée. Un premier exemple, issu de la référence 60, est présenté sur la Fig. C.3. On y voit une zone amorphe 2D après implantation à travers un masque et au cours du recuit. En haut, le masque est conservé lors du recuit, et impose donc une tension sur la zone en cours de recristallisation. En bas, le masque est enlevé avant le recuit, la surface est libre. La dépendance

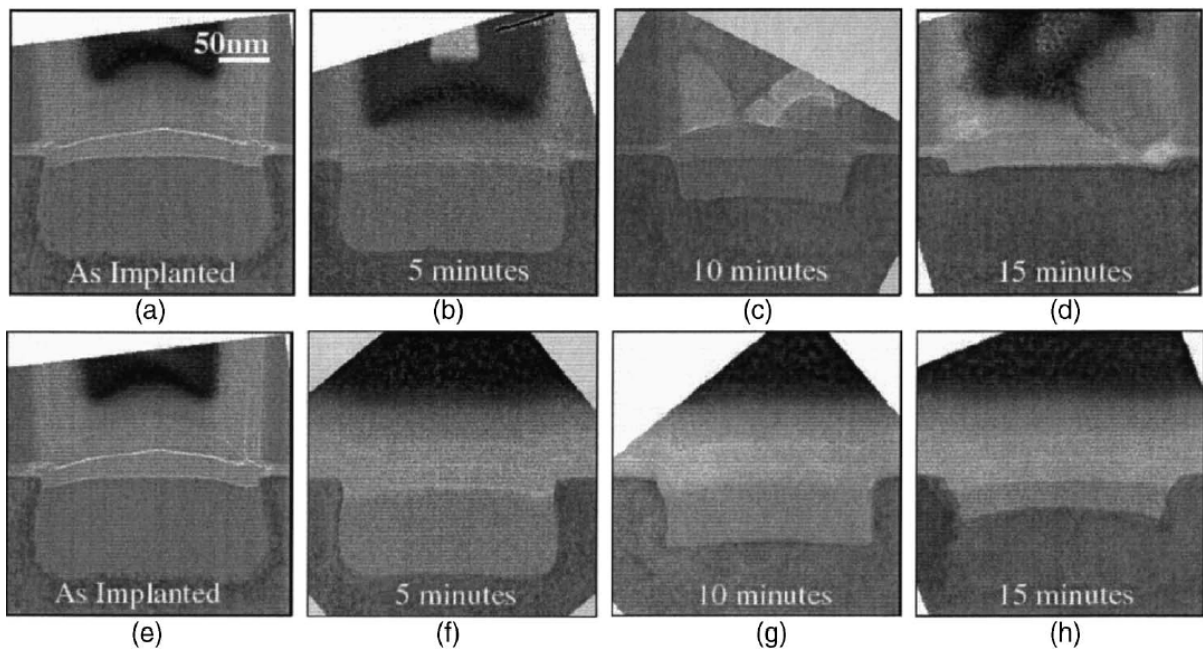


Figure C.3: Image TEM sur la tranche d'une zone amorphe en recristallisation à 550 °C. En haut le masque de nitrure est conservé, en bas il est enlevé par gravure. Issu de la référence 60.

de la vitesse de recristallisation en fonction de la direction crée des défauts de coins (en bas), qui se trouvent fortement atténués en présence de la contrainte imposée par le film en surface (en haut).

Un second exemple de recristallisation en présence de fortes contraintes est représenté sur la Fig. C.4 à partir de la référence 61. On y voit une ailette de transistor FinFET sous deux angles différents. L'image de gauche montre l'environnement de l'ailette et les parties amorphe et cristalline de l'ailette après implantation à travers le nitrure. Les trois images de droite montrent des vues en coupe de l'ailette. Après implantation (a), la partie cristalline est très fine. Hors c'est elle qui sert de germe à la recristallisation dans une épitaxie. Après un recuit à basse température (b), la recristallisation n'est que partielle, et le sommet de la partie recristallisée est arrondi. Après recuit à haute température (c), il semble que la nucléation spontanée de grains cristallins dispersés soit entrée en compétition avec l'épitaxie, et une couche de poly-Si est formé sur un tiers de la hauteur de l'ailette.

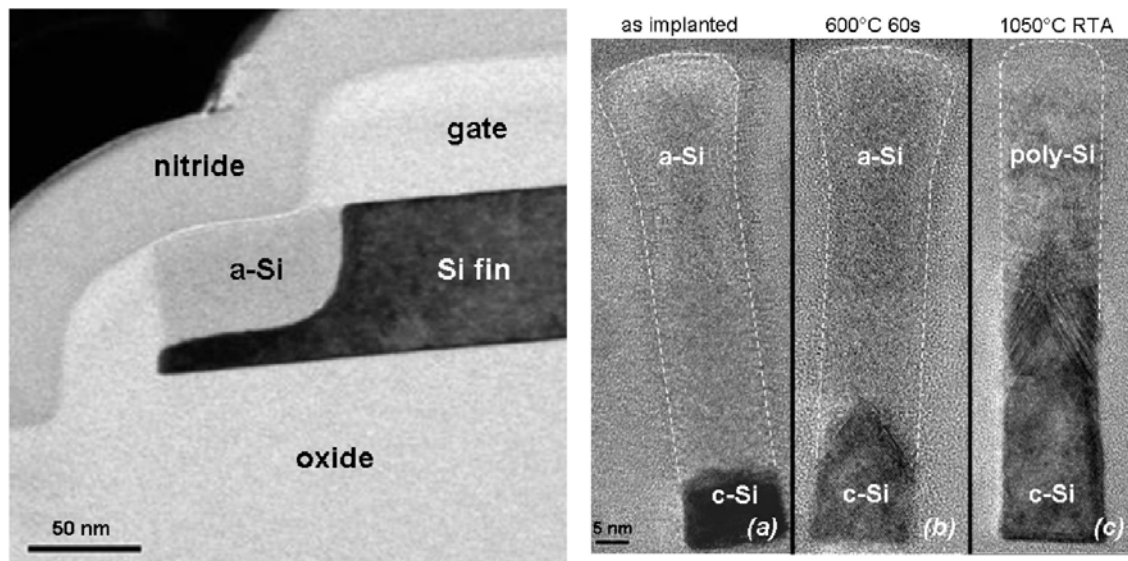


Figure C.4: Images TEM sur la tranche d'une ailette de FinFET. Issu de la référence 61.

Ces deux exemples illustrent l'intérêt de comprendre et modéliser les effets d'orientation et de contrainte sur la recristallisation. Dans ce but, il est prévu d'étudier

- l'influence de la direction de l'interface amorphe/cristal, en construisant puis en recuisant des systèmes suivant la direction [100], [110] et [111] (voir Fig. C.5)

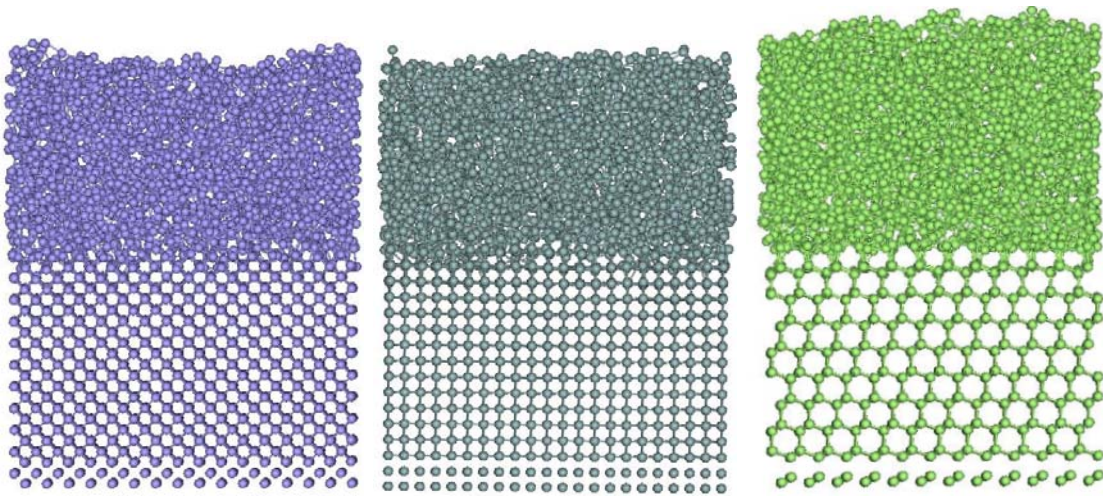


Figure C.5: Empilements amorphe/cristal d'environ 5000 atomes. De gauche à droite, direction de l'interface : $[100]$, $[110]$ et $[111]$.

- l'influence des conditions aux limites : système 2D, 1D ou 0D
- l'influence des contraintes. Pour cela, nous prévoyons d'utiliser une approche multi-échelle, les contraintes étant calculées en continu par éléments finis dans un code TCAD standard par Christophe KRZEMINSKI qui a développé une expertise en calcul des contraintes dans les dispositifs microélectroniques notamment dans le cadre du projet intégré PullNANO. Ces contraintes seront ensuite ajoutées aux atomes en bord de boîte lors du calcul de la recristallisation par dynamique moléculaire.

Projets à plus long terme

Simulation de la diffusion/oxydation dans les nanofils de silicium

A plus long terme, la dynamique moléculaire est l'outil idéal pour étudier les dispositifs nanométriques, par exemple les nanofils de silicium. Un de nos projets consisterait à construire un nanofil oxydé en adaptant une procédure développée pour des sphères et des plans par Dalla Torre et al.⁶² (Fig. C.6). Puis la structure obtenue pourrait alors servir de point d'entrée pour le calcul des propriétés électroniques en liaisons fortes par l'équipe de Physique théorique de l'IEMN (Christophe DELERUE et ses collaborateurs), éventuellement en incorporant des dopants comme le bore. Ces résultats pourraient être

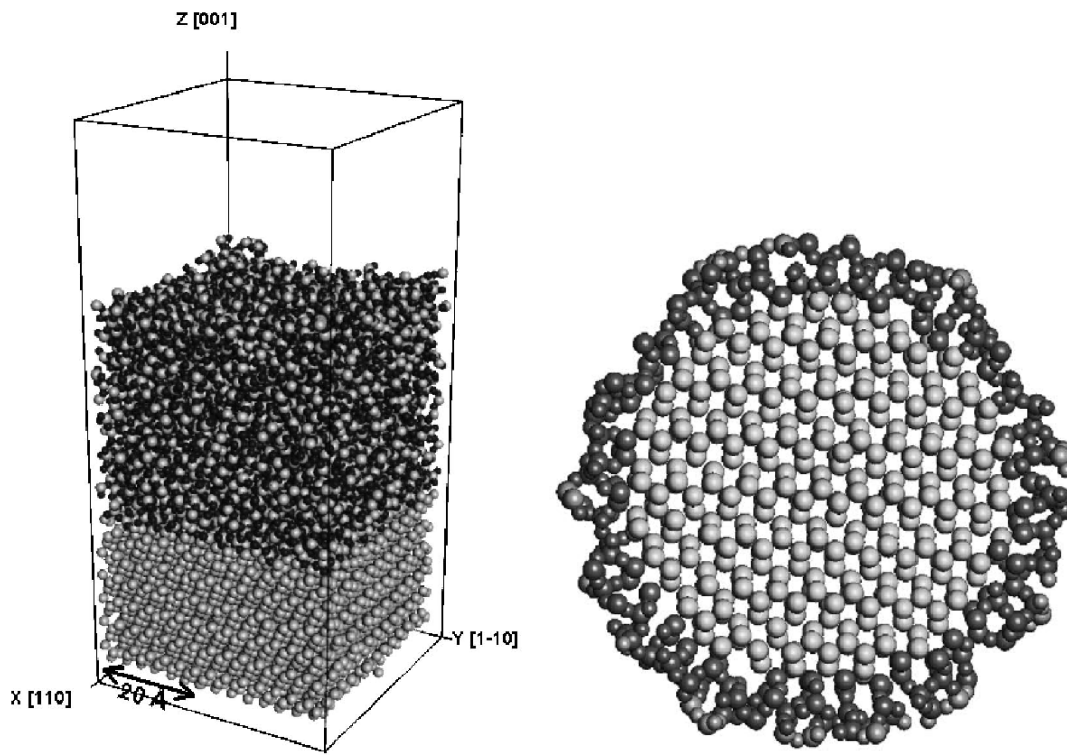


Figure C.6: Empilement SiO_2 sur Si (à gauche). Sphère oxydée (à droite). Résultat de la procédure de simulation exposée dans la référence 62.

confrontés aux expériences menées entre autres à l'IEMN pour fabriquer des dispositifs à l'aide de nanofils de silicium, soit par une approche "top-down" à partir de fils obtenus par lithographie puis amincis, soit par une approche "bottom-up" par croissance catalytique.

Simulation de la graphénisation du SiC

En parallèle, il me semble très intéressant de tester la méthode de simulation sur d'autres problèmes technologiques, et de l'utiliser si elle s'avère adaptée à ces problèmes. Ainsi, j'ai implémenté une version du potentiel EDIP destiné à décrire les interactions Si-C⁶³ pour étudier la graphénisation de ce matériau. En effet, lorsque le 6H-SiC est chauffé, on observe d'abord des reconstructions de la surface dépendant de la terminaison Si ou C de celle-ci, suivie de la formation d'un ou plusieurs plans de graphène. La Fig. C.7 montre des images STM de la surface couverte d'une couche (en haut) et de deux couches (en bas) de graphène. En plus des hexagones du graphènes, on y voit une structure hexagonale qui disparaît à partir de la deuxième couche. La réalisation de plans de graphène est étudiée

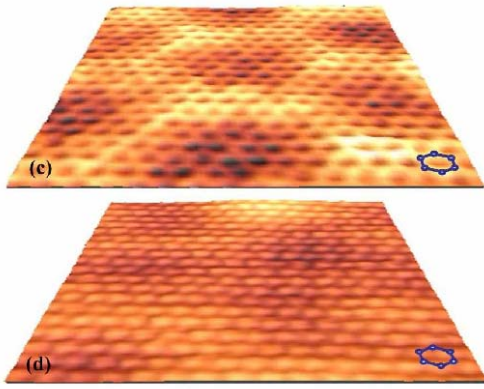


Figure C.7: Images STM de la surface SiC graphénisée. En haut, une couche de graphène, en bas deux couches de graphène. Issu de la référence 64.

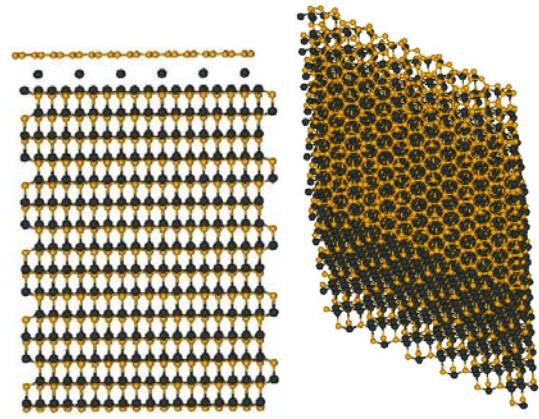


Figure C.8: Deux vues de la structure construite pour étudier la graphénisation du SiC : un bloc de SiC, une surface supérieure reconstruite avec des adatoms de Si, et au-dessus un plan de graphène.

pour des applications microélectroniques, la longueur de cohérence des électrons y étant très élevée. Ce travail sera réalisé en collaboration avec Catherine PRIESTER, théoricienne des reconstructions de surface, avec qui nous essaierons de comprendre comment la surface du SiC se reconstruit, et comment le plan de graphène se stabilise sur la surface (voir Fig. C.8), avant de tenter de simuler la graphénisation elle-même. Les simulations seront confrontés notamment aux expériences réalisées à l'IEMN par Dominique VIGNAUD et Xavier WALLART.

Les perspectives de mes recherches viseront donc à mettre au service du développement technologique de dispositifs microélectroniques un outil de simulation atomistique, adapté aux dispositifs de petites dimensions, et enrichi progressivement de nouveaux potentiels interatomiques pour permettre de décrire les matériaux qui compléteront le traditionnel silicium massif.

Bibliographie

- ¹ “Calculs de structure électronique et dynamique des porteurs dans les nanostructures de silicium”, E. Martin-Lampin, Thèse de doctorat en Sciences des Matériaux, Université des Sciences et Technologies de Lille, 25 novembre 1997.
- ² IMPACT, Isen Modeling PAckage for integrated Circuit Technology - Users'guide- V. Senez, E. Lampin, T. Hoffmann, P. Ferreira, E. Vandenbossche, B. Baccus et D. Collard.
- ³ MODYC, MOlecular DYnamic Code - Users'guide- E. Lampin, C. Krzeminski, C. Priester, Q. Brulin and E. Lecat.
- ⁴ M. I. Current, M. A. Foad, A. J. Murrell, E. J. H. Collart, G. de Cock et D. Jennings, *J. Vac. Sci. Technol. B* **18**, 468 (2000).
- ⁵ D. Alquier, N. E. B. Cowern, P. Pichler, C. Armand, A. Martinez, D. Mathiot, M. Omri et A. Claverie, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **532**, 67 (1998).
- ⁶ N. Cherkashin, P. Calvo, F. Cristiano, B. de Mauduit et A. Claverie, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **810**, C3.7 (2004).
- ⁷ A. Claverie, B. Colombeau, G. Ben Assayag, C. Bonafos, F. Cristiano, M. Omri et B. de Mauduit, *Mater. Science Semicond. Process.* **3**, 269 (2000).
- ⁸ A. Claverie, F. Cristiano, B. Colombeau et N. Cowern, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **610**, B11.6 (2000).
- ⁹ “Intrinsic Point Defects, Impurities, and Their Diffusion in Silicon”, P. Pichler, édité par S. Selberherr (Springer-Verlag, Wien) 2004.
- ¹⁰ E. Lampin, V. Senez et A. Claverie, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **610**, B10.4 (2000).
- ¹¹ E. Lampin, V. Senez et A. Claverie, *J. Appl. Phys.* **85**, 8137 (1999).

- ¹² ISE TCAD Tools: FLOOPS-ISE User's Manual, ISE 10, (2004).
- ¹³ N. E. B. Cowern, G. Mannino, P. A. Stolk, F. Roozeboom, H. G. A. Huizing, J. G. M. van Berkum, F. Cristiano, A. Claverie, et M. Jaraíz, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4460 (1999).
- ¹⁴ A. Claverie, B. Colombeau, B. de Mauduit, C. Bonafos, X. Hebras, G. Ben Assayag et F. Cristiano, *Appl. Phys. A* **76**, 1025 (2003).
- ¹⁵ C. J. Ortiz, P. Pichler, T. Fühner, F. Cristiano, A. Claverie, B. Colombeau et N. E. B. Cowern, *J. Appl. Phys.* **96**, 4866 (2004).
- ¹⁶ C. Bonafos, D. Mathiot et A. Claverie, *J. Appl. Phys.* **83**, 3008 (1998).
- ¹⁷ F. Cristiano, J. Grisolia, B. Colombeau, M. Omri, B. de Mauduit, A. Claverie, L. F. Giles et N. E. B. Cowern, *J. Appl. Phys.* **87**, 8420 (2000).
- ¹⁸ F. Cristiano, N. Cherkashin, X. Hebras, P. Calvo, Y. Lamrani, E. Scheid, B. de Mauduit, B. Colombeau, W. Lerch, S. Paul et A. Claverie, *Nucl. Instr. Methods Phys. Res. B* **216**, 46 (2004).
- ¹⁹ E. Lampin, F. Cristiano, Y. Lamrani, A. Claverie, B. Colombeau et N. E. B. Cowern, *J. Appl. Phys.* **94**, 7520 (2003).
- ²⁰ A. Corana, M. Marchesi, C. Martini et S. Ridella, *ACM Trans. Math. Software* **13**, 262 (1987).
- ²¹ "Contribution à l'étude expérimentale et à la simulation de la diffusion anormale du bore dans le silicium", Y. Lamrani, Thèse de Doctorat en Microélectronique, Toulouse, le 23 mars 2005.
- ²² "ST-IEMN : SProcess script evaluation", J. Delalleau, Rapport de Stage ST, été 2006.
- ²³ "Computer simulations of liquids", M. P. Allen, D. J. Tildesley, Oxford, Clarendon Press (1987).
- ²⁴ L. Verlet, *Phys. Rev.* **159**, 98 (1967).
- ²⁵ R. P. Feynman, R. B. Leighton et M. Sands, "The Feynman Lectures on Physics", Vol. 1, Addison-Wesley, 1963, Chapitre 9 ("Newton's Laws of Dynamics").
- ²⁶ S. Nosé, *Molecular Phys.* **52**, 255 (1984).
- ²⁷ W. Hoover, *Phys. Rev.* **A31**, 1695 (1985).

- ²⁸ S. A. Adelman et J. D. Doll, *J. Chem. Phys.* **64**, 2375 (1976).
- ²⁹ H. J. C. Berendsen, J. P. M. Postma, W. F. van Gunsteren, A. DiNola et J. R. Haak, *J. Chem. Phys.* **81**, 3684 (1984).
- ³⁰ F. H. Stillinger et T. A. Weber, *Phys. Rev. B* **31**, 5262 (1985).
- ³¹ J. Tersoff, *Phys. Rev. B* **38**, 9902 (1988).
- ³² J. F. Justo, M. Z. Bazant, E. Kaxiras, V. V. Bulatov et S. Yip, *Phys. Rev. B* **58**, 2539 (1998).
- ³³ T. J. Lenosky, B. Sadigh, E. Alonso, V. V. Bulatov, T. Diaz de la Rubia, J. Kim, A. F. Voter et J. D. Kress, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **8**, 825 (2000).
- ³⁴ M. D. Kluge et J. R. Ray, *Phys. Rev. B* **39**, 1738 (1989).
- ³⁵ C. Roland et G. H. Gilmer, *Phys. Rev. B* **46**, 13428 (1992).
- ³⁶ T. Watanabe et I. Ohdomari, *Thin Solid Films* **343-344**, 370 (1999).
- ³⁷ S. Yoo et X. C. Zeng, *J. Chem. Phys.* **119**, 1442 (2003).
- ³⁸ G. T. Barkema et N. Mousseau, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4358 (1996).
- ³⁹ W. D. Luedtke et U. Landman, *Phys. Rev. B* **37**, 4656 (1988).
- ⁴⁰ E. J. Albenze et P. Clancy, *Mol. Simu.* **31**, 11 (2005).
- ⁴¹ P. B. Rasband, P. Clancy et M. O. Thompson, *J. Appl. Phys.* **79**, 8998 (1996).
- ⁴² J. C. Noya, C. P. Herrero et R. Ramírez, *Phys. Rev. B* **56**, 15139 (1997).
- ⁴³ P. B. Rasband, P. Clancy et B. W. Roberts, *J. Appl. Phys.* **84**, 2471 (1998).
- ⁴⁴ J. Tersoff, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 632 (1986).
- ⁴⁵ J. Tersoff, *Phys. Rev. B* **37**, 6991 (1988).
- ⁴⁶ L. A. Marqués, L. Pelaz, J. Hernández, J. Barbolla et G. H. Gilmer, *Phys. Rev. B* **64**, 045214 (2001).
- ⁴⁷ S. Izumi, S. Hara, T. Kumagai, S. Sakai, *J. Crystal Growth* **274**, 47 (2005).
- ⁴⁸ M. Z. Bazant et E. Kaxiras, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4370 (1996).

- ⁴⁹ M. Z. Bazant, E. Kaxiras et J. F. Justo, Phys. Rev. B **56**, 8542 (1997).
- ⁵⁰ S. Goedecker, Comp. Phys. Commun. **148**, 124 (2002).
- ⁵¹ V. Cuny, Q. Brulin, E. Lampin, E. Lecat, C. Krzeminski et F. Cleri, Europhys. Lett. **76**, 842 (2006).
- ⁵² P. J. Timans, W. Lerch, S. Paul, J. Niess, T. Huelsmann et P. Schmid, Solid State Technol. **47**, 35 (2004).
- ⁵³ “Procédé laser de réalisation de jonctions ultra-minces pour la microélectronique silicium: étude expérimentale, modélisation et tests de faisabilité”, M. Hernandez, thèse de doctorat en Sciences, Université d’Orsay, 25 mai 2005.
- ⁵⁴ G. L. Olson et J. A. Roth, Mater. Sci. Rep. **3**, 1 (1988).
- ⁵⁵ F. Wooten, K. Winer et D. Weaire, Phys. Rev. Lett. **54**, 1392 (1985).
- ⁵⁶ A. Mattoni et L. Colombo, Phys. Rev. B **69**, 045204 (2004).
- ⁵⁷ G. J. Galvin, J. W. Mayer et P. S. Peercy, Appl. Phys. Lett. **46**, 644 (1985).
- ⁵⁸ C. Krzeminski, Q. Brulin, V. Cuny, E. Lecat, E. Lampin et F. Cleri, J. Appl. Phys. **101**, 123506 (2007).
- ⁵⁹ A. M. C. Pérez-Martín, J. Domínguez-Vázquez et J. J. Jiménez-Rodríguez, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **164-165**, 431 (2000).
- ⁶⁰ C. R. Olson, E. Kuryliw, B. E. Jones et K. S. Jones, J. Vac. Sci. Technol. B **24**, 446 (2006).
- ⁶¹ R. Duffy, M. J. H. Van Dal, B. J. Pawlak, M. Kaiser, R. G. R. Weemaes, B. Degroote, E. Kunnen et E. Altamirano, Appl. Phys. Lett. **90**, 241912 (2007).
- ⁶² J. Dalla Torre, J.-L. Bocquet, Y. Limoge, J.-P. Crocombette, E. Adam, G. Martin, T. Baron, P. Rivallin et P. Mur, J. Appl. Phys. **92**, 1084 (2002).
- ⁶³ “Etude théorique à l’échelle nanométrique du carbure de silicium sous irradiation : modélisation classique et *ab initio*”, H. Lucas, thèse de doctorat en Sciences pour l’Ingénieur et Aéronautique, Université de Poitiers, 27 octobre 2006.
- ⁶⁴ P. Mallet, F. Varchon, C. Naud, L. Magaud, C. Berger et Y.-Y. Veillen, Phys. Rev. B **76**, 041403 (2007).

Annexe I

Curriculum vitae

Formation

- Junin 1994 Obtention du diplôme d'ingénieur ISEN, option physique
DEA de Sciences des Matériaux à l'Université des Sciences
et Technologies de Lille
- Sept. 94
à Aout 97 Doctorante à l'Institut d'Electronique, de Microélectronique
et de Nanotechnologies (IEMN)
Directeur de thèse : Michel Lannoo
Sujet de thèse : *Application de calculs de la structure électronique
à l'étude de la dynamique des porteurs dans des nanostructures
de silicium*
- 25 Novembre 97 Soutenance de la thèse

Expérience

- Septembre 1997 Enseignant-chercheur à l'ISEN
à novembre 2001 Equipe Microélectronique Silicium de l'IEMN
Simulation des défauts étendus dans le silicium
- Décembre 2001 Chargée de Recherche au CNRS - Temps partiel (80%)
Equipe Microélectronique Silicium de l'IEMN
Simulations continues puis atomistiques pour les jonctions minces

Publications dans des revues internationales

Sur le silicium poreux :

- *Luminescence of silicon crystallites*
C. Delerue, E. Martin, J.-F. Lampin, G. Allan, M. Lannoo
J. Phys. IV, C5 **3**, 359 (1993)
- *Theory of excitonic exchange splitting and optical Stokes shift in silicon nanocrystallites: Application to porous silicon*
E. Martin, C. Delerue, G. Allan, M. Lannoo
Phys. Rev. B **50**, 18258 (1994)
- *Theoretical description of porous silicon*
C. Delerue, M. Lannoo, G. Allan, E. Martin
Thin Solid Films **255**, 27-34 (1995)
- *Saturation and voltage quenching of the porous silicon luminescence, the importance of the Auger effect*
I. Mihalcescu, J.-C. Vial, A. Bsiesy, F. Muller, R. Romestain, E. Martin, C. Delerue, M. Lannoo, G. Allan
Phys. Rev. B **51**, 17605 (1995)
- *Auger and Coulomb charging effects in semiconductor nanocrystallites*
C. Delerue, M. Lannoo, G. Allan, E. Martin, I. Mihalcescu, J.-C. Vial, R. Romestain, F. Muller, A. Bsiesy
Phys. Rev. Lett. **75**, 2228 (1995)
- *Hydrogenic impurity levels, dielectric constant and Coulomb charging effects in silicon crystallites*
G. Allan, C. Delerue, M. Lannoo, E. Lampin
Phys. Rev. B **52**, 11982 (1995)
- *Frequency-dependent hopping conductivity between silicon nanocrystallites: Application to porous silicon*
E. Lampin, C. Delerue, M. Lannoo, G. Allan
Phys. Rev. B **58**, 12044 (1998)

- *Modeling of the kinetics of dislocation loops*
E. Lampin, V. Senez
Nuclear Inst. and Meth. in Phys. Res. B **147**, 13 (1998).
- *Modeling of the transient enhanced diffusion of boron implanted into preamorphized silicon*
E. Lampin, V. Senez, A. Claverie
J. Appl. Phys. **85**, 8137 (1999).
- *Modelisation of extended defects to simulate the transient enhanced diffusion of boron*
E. Lampin, V. Senez, A. Claverie
Mat. Sci. Eng. B **71**, 155 (1999).
- *Accurate modeling of large angle tilt (LATID) and pure vertical implantations: Application to the simulation of n- and p-LDMOS backgates*
E. Lampin, E. Dubois, H. Xu, S. Bardy, F. Murray
IEEE Trans. Electron Devices **50**, 1401 (2003).
- *Prediction of boron transient enhanced diffusion through the atom-by-atom modeling of extended defects*
E. Lampin, F. Cristiano, Y. Lamrani, A. Claverie, B. Colombeau, N. E. B. Cowern
J. Appl. Phys. **94**, 7520 (2003).
- *Coupling of atom-by-atom calculations of extended defects with B kick-out equations: application to the simulation of boron TED*
E. Lampin, F. Cristiano, Y. Lamrani, B. Colombeau
Nuclear Inst. and Meth. in Phys. Res. B **216**, 95 (2004).
- *Depth dependence of defect evolution and TED during annealing*
B. Colombeau, N. E. B. Cowern, F. Cristiano, P. Calvo, Y. Lamrani, N. Cherkashin, E. Lampin, A. Claverie
Nuclear Inst. and Meth. in Phys. Res. B **216**, 90 (2004).

- *Combined master and Fokker-Planck equations for the modeling of the kinetics of extended defects in Si*
E. Lampin, C. J. Ortiz, N. E. B. Cowern, B. Colombeau, F. Cristiano
Solid State Electron. **49**, 1168 (2005).
- *Optimisation of the parameters of an extended defect model applied to non-amorphizing implants*
E. Lampin, F. Cristiano, Y. Lamrani, D. Connetable
Mat. Sci. Eng. B. **124-125**, 397 (2005).
- *Impact of large angle tilt implantation on the threshold voltages of LDMOS transistor on SOI*
H. Xu, E. Lampin, E. Dubois
Mat. Sci. Eng. B. **124-125**, 323 (2005).
- *Diffusion and activation of dopants in silicon and advanced silicon-based materials*
P. Pichler, C. J. Ortiz, B. Colombeau, N. E. B. Cowern, E. Lampin, S. Uppal, M. S. A. Karunaratne, J. M. Bonar, A. F. W. Willoughby, A. Claverie, F. Cristiano, W. Lerch, S. Paul
Phys. Scr. **T126**, 89-96 (2006).
- *Silicon dry oxidation kinetics at low temperature in the nanometric range: Modeling and experiment*
C. Krzeminski, G. Larrieu, J. Penaud, E. Lampin and E. Dubois
J. Appl. Phys. **101**, 064908 (2007).

Sur la dynamique moléculaire :

- *Diffusion of boron in silicon: Compatibility of empirical molecular dynamics with continuum simulations*
V. Cuny, Q. Brulin, E. Lampin, E. Lecat, C. Krzeminski and F. Cleri
Europhys. Lett. **76**, 842 (2006).
- *Molecular dynamics simulation of the recrystallization of amorphous Si layers: Comprehensive study of the dependence of the recrystallization velocity on the interatomic potential*
C. Krzeminski, Q. Brulin, V. Cuny, E. Lecat, E. Lampin and F. Cleri
J. Appl. Phys. **101**, 123506 (2007).

Annexe II

Activités autour de la recherche et l'enseignement

1 Enseignement

J'ai enseigné les matières suivantes à l'ISEN de 1996 à 2001 :

- Projet de *Physique du Solide* en seconde année de cycle ingénieur - 40 heures.
- Module optionnel sur l'*Electronique Moléculaire* en seconde année de cycle ingénieur - 40 heures.
- Travaux dirigés de *Physique des Composants* en seconde année de cycle ingénieur - 20 heures.
- Travaux dirigés de *Junction p-n, transistor bipolaire et MOS* en première année de cycle ingénieur - 6 heures

Depuis décembre 2001, je travaille à temps partiel comme Chargée de Recherche au CNRS, je n'ai donc plus le droit d'exercer une activité complémentaire, l'enseignement compris.

2 Encadrement

- Trois binômes d'étudiants ISEN en projet de seconde année de cycle ingénieur en 1998, 2000 et 2006 (janvier-juin)
- Tahsin AKALIN, post-doctorant, septembre 2003 - juin 2004
- Valérie CUNY, post-doctorante, mars 2004 - décembre 2005
- Emmanuel LECAT, doctorant, octobre 2005-octobre 2006
- Quentin BRULIN, post-doctorant, février2006-décembre 2007

J'ai par ailleurs accueilli à plusieurs reprises des doctorants/ post-doctorants du LAAS (Younes LAMRANI et Damien CONNÉTABLE) dans le cadre de collaborations avec Fuccio CRISTIANO (projets européens FRIENDTECH et NanoCMOS).

3 Activités contractuelles

- Projet européen FRIENDTECH IST 2000-30129 - *Front-End Models for Silicon Future Technology* - Septembre 2001 à octobre 2004. Partenaires : FhG-IISB, CEMES-LAAS, IEMN, IMM, IMEL, ISE-AG, ISEN, Philips, Research Institute for Technical Physics and Materials Science, University of Southampton et University of Surrey. Représentante de l'ISEN. Activité de simulation des défauts étendus.
- Laboratoire commun ST-IEMN - Mars 2003 à février 2008. Responsable de la thématique *Simulations*. Activité de simulations des défauts étendus et de simulation multi-échelle pour la diffusion des dopants.
- Projet intégré NanoCMOS - *CMOS backbone for 2010 e-Europe NanoCMOS. From the 45 nm down to the limits* - Mars 2004 à juin 2006. Partenaires : ST Microelectronics, Philips, Infineon, IMEC, CEA-Leti, CNRS, FhG/IISB, ZFM, Ion beam services, Magwel, ACIES, Freescale et Dolphin Integration. Responsable du deliverable 5203. Activité de simulation des défauts étendus.
- Projet intégré PullNANO - *Pulling the limits of NanoCMOS electronics* - Juin 2006 à novembre 2008. Partenaires : STMicroelectronics, NXP, Philips , FREESCALE,

Infineon, Qimonda, IMEC, CEA-LETI, FhG-IISB, CNRS, ZFM, University of Newcastle upon Tyne, Université de Savoie, Technische Universitaet Wien, Université Catholique de Louvain, Consorzio Nazionale Interuniversitario per la Nanoelettronica, Swiss Federal Institute of Technology), University of Glasgow, Warsaw University of Technology, Chalmers University of Technology, AMO, Forschungszentrum Juelich, The University of Liverpool, National Technical University of Athens, University College Cork - National University of Ireland, University of Warwick, European Synchrotron Radiation Facility, The University of Surrey, Ion Beam Services, Integrated Systems Development, MAGWEL, ACIES. Représentante CNRS pour le subpackage SP5. Activité de simulation atomistique de la recristallisation du silicium.

4 Responsabilités

- Représentante de l'ISEN pour le projet européen FRENDECH - 2001 à 2004.
- Responsable de l'activité *Simulations* du laboratoire commun ST-IEMN - 2003 à 2008.
- Responsable du deliverable 5203 du projet intégré PullNANO - 2004 à 2006.
- Représentante du CNRS pour le subpackage SP5 du projet intégré PullNANO- 2006 à 2008.
- Co-responsable avec E. Dubois de l'activité *Simulation de procédés et de dispositifs silicium* de l'IEMN - opération III.2 - 2000 à 2002.
- Responsable de l'activité *Modélisation et simulation des technologies et dispositifs avancés* - opération 3.3.2 - 2002 à nos jours.

Annexe III

Publications

Dans cette annexe se trouvent les principales publications afférentes aux travaux présentés dans ce manuscrit.

Il s'agit pour la partie *Simulations continues des défauts étendus* de :

- “*Modeling of the transient enhanced diffusion of boron implanted into preamorphized silicon*”, E. Lampin and V. Senez, J. Appl. Phys. **85**, 8137 (1999).
- “*Prediction of boron transient enhanced diffusion through the atom-by-atom modeling of extended defects*”, E. Lampin, F. Cristiano, Y. Lamrani, A. Claverie, B. Colombeau and N. E. B. Cowern, J. Appl. Phys. **94**, 7520 (2003).
- “*Combined master and Fokker-Planck equations for the modeling of the kinetics of extended defects in Si*”, E. Lampin, C. J. Ortiz, N. E. B. Cowern, B. Colombeau and F. Cristiano, Solid-State Electron. **49**, 1168 (2005).

et pour la partie *Simulations atomistiques pour la formation des jonctions ultra-minces* de :

- “*Diffusion of boron in silicon: Compatibility of empirical molecular dynamics with continuum simulations*”, V. Cuny, Q. Brulin, E. Lampin, E. Lecat, C. Krzeminski and F. Cleri, Europhys. Lett. **76**, 842 (2006).

- “*Molecular dynamics simulation of the recrystallization of amorphous Si layers: comprehensive study of the dependence of the recrystallization velocity on the interatomic potential*”, C. Krzeminski, Q. Brulin, V. Cuny, E. Lecat, E. Lampin and F. Cleri, J. Appl. Phys. **101**, 123506 (2007).