

Master's thesis: Caractérisation de la surface d'énergie potentielle des matériaux complexes et son application sur la cinétique du S_iO_2/Si

Kokou Gawonou N'TSOUAGLO,

e-mail: gawonou01@gmail.com

Home institute: Université de Lomé, Togo,
Faculté des Sciences, Département de physique.

Host institute: Université de Montréal, Canada,
Département de physique.

Abstract

In this Master's thesis, we use the numerical methods such as molecular dynamics (LAMMPS's code) and kinetic-ART which is an on-the-fly off-lattice kinetic Monte Carlo algorithm that incorporates exactly all elastic effects.

In the first, we compare a number of various algorithms used for sampling energy landscape of complex materials. The various algorithms chosen are those that use the Bell-Evans-Polanyi principle to progress on the potential energy surface. This study allowed us to understand the steps needed to escape a local minimum to another and to control research to quickly find the global minimum. This study also allowed us to understand the power of these methods on the kinetics of the structural evolution of complex materials.

In the second part, we have developed a simulation tool (ReaxFF potential coupled with Kinetics-ART) able to study the first stages and oxidation process of silicon compare to the experimental time. To validate the system in place, we have tested the very first step of the silicon oxidation. The results obtained are in agreement with the literature. This tool will be used to understand the true oxidation process, the possible transitions of oxygen atoms at the silicon surface and the barrier associated with. Problem that are real challenges for the microelectronics industry. **Keywords : Kinetics-ART, Lammms and ReaxFF potential**

Résumé

Dans ce rapport de mémoire, nous avons utilisé les méthodes numériques telles que la dynamique moléculaire (code de Lammmps) et ART-cinétique. Ce dernier est un algorithme de Monte Carlo cinétique hors réseau avec construction du catalogue d'événements à la volée qui incorpore exactement tous les effets élastiques.

Dans la première partie, nous avons comparé et évalué des divers algorithmes de la recherche du minimum global sur une surface d'énergie potentielle des matériaux complexes. Ces divers algorithmes choisis sont essentiellement ceux qui utilisent le principe Bell-Evans-Polanyi pour explorer la surface d'énergie potentielle. Cette étude nous a permis de comprendre d'une part, les étapes nécessaires pour un matériau complexe d'échapper d'un minimum local vers un autre et d'autre part de contrôler les recherches pour vite trouver le minimum global. En plus, ces travaux nous ont amené à comprendre la force de ces méthodes sur la cinétique de l'évolution structurale de ces matériaux complexes.

Dans la deuxième partie, nous avons mis en place un outil de simulation (le potentiel ReaxFF couplé avec ART-cinétique) capable d'étudier les étapes et les processus d'oxydation du silicium pendant des temps long comparable expérimentalement. Pour valider le système mis en place, nous avons effectué des tests sur les premières étapes d'oxydation du silicium. Les résultats obtenus sont en accord avec la littérature. Cet outil va être utilisé pour comprendre les vrais processus de l'oxydation et les transitions possibles des atomes d'oxygène à la surface du silicium associée avec les énergies de barrière, des questions qui sont des défis pour l'industrie micro-électronique.

Mots clés: ART-cinétique, Lammmps, Potentiel ReaxFF