

50376
1995
33

Gen 20103581

50376
1995
33



THESE

présentée à
L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE LILLE
(arrêté ministériel du 30 Mars 1992)
pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE

Spécialité : ELECTRONIQUE

par

Vincent SENEZ

Ingénieur de l'Institut Supérieur d'Electronique du Nord

**MODELISATION
BIDIMENSIONNELLE DE
L'OXYDATION DU SILICIUM :
ANALYSE VISCOELASTIQUE DE LA
RELAXATION DES CONTRAINTES**

Soutenue le 10 Janvier 1995, devant la commission d'examen :

| | |
|--------------------------|--|
| Président : | Mr. E. Constant |
| Rapporteurs : | Mr. G. Sarrabayrouse Mr. A. Poncet |
| Directeur de Recherche : | Mr. M. Lannoo |
| Examineurs : | Mr. J. Borel Mr. S. Déléonibus Mr. M. Brault Mr. D. Collard |

à mes parents

à Florence

à ma famille

à mes amis

Cette thèse a été préparée à
l'Institut Supérieur d'électronique du Nord
au sein de l'Unité Mixte de Recherche 9929 Associée au CNRS.

J'exprime ma reconnaissance à Monsieur le Professeur E. CONSTANT qui a accepté la présidence de ce jury.

Je tiens à remercier sincèrement Messieurs G. SARRABAYROUSE et A. PONCET qui ont accepté d'être les rapporteurs de ce travail.

Monsieur J. BOREL m'a fait l'honneur de participer à mon jury de thèse. Je l'en remercie vivement.

J'exprime ma gratitude à Monsieur S. DELEONIBUS pour l'intérêt qu'il a porté à ces travaux. Nos discussions ont permis d'orienter avec beaucoup de réalisme les sujets d'application de cette étude théorique.

J'exprime ma profonde reconnaissance à Monsieur M. LANNOO pour l'accueil qu'il m'a réservé au sein de l'équipe qu'il encadre. Son expérience, sa disponibilité et son soutien m'ont été précieux.

Ma participation à la collaboration entre Philips-Caen et l'Institut Supérieur d'Electronique du Nord a été pour moi un motif d'enthousiasme permanent. J'en remercie chaleureusement Messieurs J. LEBAILLY et M. BRAULT.

Je tiens tout particulièrement à remercier Monsieur D. COLLARD, instigateur et conseiller journalier de ce travail, qui, par sa bonne humeur communicative et son dynamisme permanent, a su créer entre nous des rapports amicaux. Je lui souhaite beaucoup de plaisir et de succès dans sa nouvelle activité au pays du Soleil Levant. Gambatte Kudasai !

J'associe entièrement Messieurs B. BACCUS et E. VANDENBOSSCHE à la réussite de cette thèse. J'ai pris beaucoup de plaisir à partager ces trois passionnantes années avec eux. Vive l'amitié !

Mes encouragements les plus vifs sont adressés à Monsieur P. FERREIRA. Que notre collaboration soit source d'enthousiasme et d'amitié.

Enfin, je terminerai en faisant remarquer que l'excellente ambiance qui existe au sein du département électronique de l'ISEN est pour moi la clé de son succès et j'en remercie tous les membres, en particulier, Madame V. VANDENHENDE, qui en est l'une des artisantes principales.

Ce travail s'est déroulé dans le cadre d'une Bourse de Doctorat pour Ingénieur, cofinancée par le Centre National de la Recherche Scientifique et le Conseil Régional de la Région Nord-pas-de-Calais.

Sommaire

| | |
|---|-----------|
| <u>Chapitre 1 Introduction</u> | 9 |
| 1. ISOLATION DES CIRCUITS INTEGRES : APPLICATION AU PROCEDE BICMOS | 13 |
| 2. HISTORIQUE DES STRUCTURES D'ISOLATION LATERALES | 16 |
| 3. REGLES DE CONCEPTION D'UN DISPOSITIF D'ISOLATION | 23 |
| 4. LA SIMULATION NUMERIQUE DE TECHNOLOGIES SILICIUM | 25 |
| 5. ORGANISATION DU MANUSCRIT | 27 |
| Références bibliographiques | 29 |

Chapitre 2 Modélisation **34**

| | |
|---|-----------|
| 1. THEORIE DU MECANISME D'OXYDATION | 35 |
| 1.1 L'approche de Deal et Grove | 35 |
| 1.2 Effets des conditions expérimentales | 39 |
| 1.3 Limites du modèle de Deal et Grove | 39 |
| 1.3.1 <i>Le régime initial de l'oxydation sèche</i> | 39 |
| 1.3.2 <i>Comportement anormal à basse température</i> | 41 |
| 1.4 Les autres modélisations unidimensionnelles | 44 |
| 1.5 Conclusion | 44 |
| 2. MODELES MULTIDIMENSIONNELS | 44 |
| 2.1 Modèles analytiques 2D | 45 |
| 2.2 Modèle pseudo-analytique | 46 |
| 2.2.1 <i>Algorithme</i> | 46 |
| 2.2.2 <i>Formulation analytique du champ de contraintes induit par le nitrure</i> | 49 |
| 2.2.3 <i>Exemples d'application</i> | 53 |
| 2.3 Modèles Numériques 2D | 56 |
| 2.4 Modèles Numériques 3D | 59 |
| 3. ANNEXE | 60 |

Références bibliographiques **65**

Chapitre 3 L'approche IMPACT-4 **71**

| | |
|---|-----------|
| 1. SCHEMAS ALGORITHMIQUES | 72 |
| 2. LE MECANISME D'OXYDATION | 76 |
| 2.1 La diffusion des agents oxydants | 76 |
| 2.2 Formulation et résolution du problème mécanique | 79 |
| 2.2.1 <i>Contraintes et déformations : définition des variables</i> | 79 |
| 2.2.2 <i>Expression de la sollicitation initiale</i> | 84 |
| 2.2.3 <i>RHEOLOGIE des matériaux</i> | 85 |
| 2.2.4 <i>Formulation du principe d'équilibre</i> | 93 |
| 2.2.5 <i>Effet des contraintes</i> | 97 |

| | |
|---|------------|
| 3. STRATEGIE NUMERIQUE | 100 |
| 3.1 Le maillage | 100 |
| 3.2 La résolution numérique | 102 |
| 3.3 La régénération de la géométrie | 104 |
| 4. VALIDATION DE LA ROBUSTESSE NUMERIQUE DES DEUX MODELES PAR SIMULATION DE DIFFERENTS PROCEDES D'ISOLATION | 107 |
| 4.1 Exemple 1 : la structure SWAMI | 108 |
| 4.2 Exemple 2 : Oxydation basse température et haute pression | 109 |
| 4.3 Exemple 3 : le LOCOS enterré | 110 |
| 4.4 Exemple 4 : Structure SILO | 111 |
| 4.5 Exemple 5 : Validation globale | 112 |
| 4.6 Exemple 5 : comparaison des deux approches | 113 |
| 4.7 Exemple 7 : La structure PBL | 116 |
| Références bibliographiques | 119 |
| | |
| <u>Chapitre 4 Analyse des contraintes</u> | 123 |
| 1. ORIGINES ET EFFETS DES CONTRAINTES MECANIQUES | 123 |
| 2. PARAMETRES DE L'OXYDATION INFLUENCANT LE NIVEAU DES CONTRAINTES | 127 |
| 2.1 Simulation de référence | 129 |
| 2.2 Effets de la diffusivité des oxydants et du coefficient de réaction | 130 |
| 2.3 Influence de la vitesse d'oxydation | 132 |
| 2.4 Influence de la rigidité du masque d'oxydation | 133 |
| 2.5 Influence du comportement mécanique de l'oxyde | 135 |
| 3. CALIBRATION | 138 |
| 3.1 L'oxyde | 139 |
| 3.2 Le nitrure | 146 |
| 3.3 Validation | 147 |
| 4. DOMAINES DE VALIDITE DES MODELES NON-LINEAIRES VISQUEUX ET VISCOELASTIQUES | 150 |
| 4.1 Cas particulier de l'oxydation d'un substrat cylindrique | 150 |
| 4.2 Application des modèles non-linéaires visqueux et viscoélastiques au procédé LOCOS | 157 |
| Références bibliographiques | 160 |

Chapitre 5 Applications 163

| | |
|--|-----|
| 1. ETUDE DE L'ISOLATION D'UN PROCEDE BICMOS | 163 |
| 1.1 Influence de la gravure du silicium : étude qualitative | 164 |
| 1.1.1 <i>Extension de la gravure sous le masque</i> | 165 |
| 1.1.2 <i>Profondeur de la gravure</i> | 167 |
| 1.1.3 <i>Forme de la gravure sous le masque</i> | 169 |
| 1.2 Influence de la gravure du silicium : étude quantitative | 172 |
| 1.2.1 <i>Extension de la gravure sous le masque</i> | 173 |
| 1.2.2 <i>Profondeur de la gravure</i> | 174 |
| 1.2.3 <i>Pente de la gravure</i> | 175 |
| 1.2.4 <i>Rayon de courbure de l'angle concave de la gravure</i> | 178 |
| 1.3 Comportement de la structure avec des dimensions réduites | 180 |
| 1.3.1 <i>Amincissement de l'oxyde aux faibles ouvertures du masque</i> | 180 |
| 1.3.2 <i>Etude de l'efficacité des masques de longueurs réduites</i> | 185 |
| 1.4 Comparaison avec la structure LOCOS équivalente | 187 |
| | |
| 2. ANALYSE DE STRUCTURES AVANCEES | 189 |
| 2.1 Optimisation d'une structure SILO | 189 |
| 2.1.1 <i>Modélisation du scellement</i> | 190 |
| 2.1.2 <i>Simulation d'une technologie SILO-RTN</i> | 192 |
| 2.2 Etude d'une structure PBL | 196 |
| 2.2.1 <i>Influences de l'épaisseur du piédestal d'oxyde</i> | 197 |
| 2.2.2 <i>Amincissement de l'oxyde</i> | 200 |
| 2.2.3 <i>Comparaison avec d'autres types de masques</i> | 202 |
| | |
| 3. ETUDE ELECTRIQUE | 205 |
| 3.1 Procédé technologique | 206 |
| 3.2 Résultats de simulation | 207 |

| | |
|------------------------------------|-----|
| Références bibliographiques | 215 |
|------------------------------------|-----|

Chapitre 6 Conclusion et perspectives 218

| | |
|------------------------------------|-----|
| Références bibliographiques | 222 |
|------------------------------------|-----|

| | |
|--------------------------|-----|
| Liste des figures | 224 |
|--------------------------|-----|

| | |
|--------------------------|-----|
| Listes des tables | 236 |
|--------------------------|-----|

Chapitre 1

Introduction

Ce chapitre expose la situation actuelle de l'industrie des semiconducteurs et les challenges technologiques auxquels elle doit faire face depuis son entrée dans l'ère de l'ULSI (Ultra Large Scale Integration). Un des points importants consiste à améliorer les techniques d'isolation comme l'illustre l'analyse d'un procédé BICMOS avancé. Un historique de ces techniques montre que les structures d'isolation basées sur la croissance thermique d'un oxyde de silicium restent la solution la plus usitée en matière d'isolation latérale. Les règles de conception de tels dispositifs sont rappelées, démontrant la nécessité d'utiliser des outils de simulation. Les objectifs et l'état de l'art actuel de la simulation de procédés technologiques sont exposés. Le chapitre se conclut par une présentation du plan de ce manuscrit.

Durant les vingt dernières années, l'industrie des semiconducteurs a fait des progrès considérables. C'est le développement des systèmes de traitement de l'information qui est à l'origine de cette formidable évolution. En effet, l'accroissement de la demande en puissance de calcul (vitesse et complexité des traitements) et en capacité de mémoire (DRAM et SRAM), quelqu'en soit le coût, a permis une amélioration rapide des procédés de fabrication. Ainsi, chaque nouvelle génération de dispositifs (trois ans) a vu ses dimensions se réduire de 65% alors que, dans le même temps, la

densité d'intégration été multipliée par quatre [1].

La diminution des dimensions des composants de base (cellule de mémoire dynamique, transistors à effet de champ et bipolaire) s'est opérée par l'amélioration des techniques de [2 et 3]:

□ Masquage :

- Augmentation de la résolution du procédé de photolithographie par diminution de la longueur d'onde de la source de lumière, optimisation du compromis ouverture/profondeur de champ des lentilles et modification de la structure de l'optique.
- Augmentation des surfaces d'exposition par photo composition.
- Amélioration des performances des résines photo sensibles.

□ Gravure :

- Amélioration du procédé de gravure sèche (gravure de nouveaux matériaux et de multi-couches, haute sélectivité, uniformité).
- Introduction de la gravure plasma.

□ Diffusion :

- Formation de jonctions peu profondes grâce à l'utilisation 1) du recuit thermique rapide (RTA) après implantation ou 2) de source de diffusion solide (polysilicium).
- Utilisation de technique de préamorphisation du substrat implanté.
- Remplacement du Bore au profit de son composé bi-fluoré (BF_2) pour la fabrication des émetteurs bipolaires ou des drains de transistors PMOS.

L'augmentation de la densité d'intégration a été rendue possible par l'émergence de nouveaux procédés et matériaux de fabrication et par une croissance de la complexité des dispositifs [4 et 5] :

□ Isolation :

- Remplacement de l'isolation par jonction au profit de celle par oxyde.
- Formation de caissons auto-alignés dopés n ou p.
- Apparition de l'isolation par tranchée.

❑ Autoalignement :

- Apparition de l'oxydation localisée.
- Création de "spacers".
- Diffusion à partir de polysilicium dopé.

❑ Interconnexion :

- Développement des circuits à plusieurs niveaux de métal.
- Remplacement de l'aluminium par les siliciures et autres composés métalliques.

❑ Nouveaux matériaux :

- Grille polysilicium.
- Contact par siliciures.
- Masquage par oxy-nitruure.
- Oxyde de grille dopé à l'azote, au fluor ou au chlore.

❑ Dispositifs complexes :

- Cellule mémoire à capacité non plane et structure 3D.
- Transistor bipolaire en technologie "Double Poly".
- Transistor MOS à dopage non-uniforme (structure LDD, ajustement de seuil et anti-punchthrough).

Dans le sillage de l'industrie informatique, le secteur des produits dits "grand public" a intégré cette évolution technologique [6]. Ceci lui a permis de proposer aux consommateurs de nouveaux produits (compact disque, téléphone portable, ...) et d'en améliorer d'autres (télévision numérique, camescope, ...). Mais cette pénétration des circuits intégrés dans notre vie quotidienne pose de sérieux défis à l'industrie des semiconducteurs. En effet, pour rester compétitives, les applications "grand public" sont très exigeantes en termes de coûts, de fiabilité et de consommation [7]. Ainsi, il est fort probable que, dans un proche avenir, les facteurs économiques deviennent un frein au progrès technologique [8]. Les principales raisons sont:

❑ Augmentation des coûts de fabrication :

- Accroissement du nombre d'étapes dû à la complexité des dispositifs.
- Accroissement de la taille des circuits.
- Augmentation du prix des équipements.
- Testabilité plus complexe.

❑ Difficulté à amortir les investissements de recherche et développement :

- Développement de dispositifs très performants (logique CMOS rapide, technologie bipolaire à faible consommation, procédé BICMOS optimisé, ...).
- Complication des architectures des circuits intégrés.
- Réduction de la taille des marchés (sauf pour DRAM) causée par la diversification des applications : circuits produits en petite série mais à forte valeur ajoutée (ASICs), circuits de grande taille et à haute densité d'intégration (DRAM), circuits à faible consommation, circuits rapides, circuits aux performances limitées mais à faible coût.
- Multiplication des unités de fabrication et des coûts associés.

Pour pouvoir relever le challenge, il est nécessaire d'intensifier les efforts de recherche et développement dans les domaines suivants [9]:

❑ Méthodes de fabrication :

- Standardisation des technologies pour une meilleure modularisation des unités de production.
- Réduction du cycle de fabrication par utilisation d'équipements multifonctions.

❑ Equipements de fabrication :

- Amélioration des technologies dédiées au contrôle de la contamination des tranches de silicium.
- Amélioration de l'instrumentation in situ et non-destructive.
- Conception d'équipements adaptés aux tranches de silicium de large diamètre.
- Standardisation et meilleure adaptabilité afin de permettre un usage prolongé des équipements sur plusieurs générations de dispositifs.

❑ Nouveaux matériaux :

- Amélioration des propriétés des siliciures par l'introduction de nouveaux alliages.
- Remplacement de l'aluminium par le cuivre ou l'argent pour les interconnexions.
- Utilisation de nouvelles résines photosensibles.
- Mise au point de matériaux à haute permittivité pour les technologies des mémoires et à très faible constante diélectrique pour les capacités de connexion.

- Mise au point de nouveaux matériaux pour les procédés de métallisation (immunité au problème d'électromigration, contrôle du procédé de dépôt).
- Remplacement des substrats silicium par des substrats de type SOI (Silicon on Insulator).

Cependant, il est toujours nécessaire, tant que les limites physiques de la technologie silicium traditionnelle ne sont pas atteintes, de poursuivre les travaux de recherche visant à miniaturiser les circuits intégrés puisque cela reste le meilleur moyen d'améliorer leur performances (rapidité/faible consommation), d'augmenter leur intégration et de réduire leurs coûts. Dans cette perspective, l'amélioration des techniques d'isolation procure des résultats très significatifs.

1. ISOLATION DES CIRCUITS INTEGRES : APPLICATION AU PROCEDE BICMOS

On appelle isolation d'un circuit intégré l'ensemble des techniques qui permettent :

1) de rendre inopérant les dispositifs parasites (jonction PN, transistors MOS et bipolaires, thyristor, ...) créés par l'assemblage rapproché de dispositifs actifs sur un même substrat.

2) de minimiser les courants de fuite (avalanche, perçage) inhérents à la physique des semi-conducteurs.

On peut distinguer deux types d'isolation pour un circuit intégré :

- l'isolation verticale (par rapport au substrat).
- l'isolation latérale (par rapport aux autres dispositifs actifs).

L'isolation verticale consiste : 1) à réduire au maximum les courants de fuite par le substrat (courant de diffusion au travers des jonctions, punchthrough, courant de génération ou d'avalanche), 2) à éviter le phénomène de latch-up [10]. Cette isolation est réalisée par jonction grâce à l'optimisation de l'épaisseur et du dopage de couches épitaxiées, de couches enterrées et à l'application de polarisations adéquates.

L'isolation latérale a pour but de déconnecter les dispositifs actifs entre eux. Elle s'obtient par l'optimisation de structures spécifiques (constituées par des oxy-

des épais ou des gravures profondes du substrat remplies par un diélectrique) et d'implantations de champ.

Afin d'illustrer l'importance et la diversité des méthodes d'isolation dans les procédés de fabrication des circuits microélectroniques, la coupe schématique d'un dispositif BICMOS avancé est présentée à la figure 1 [11, 12 et 13].

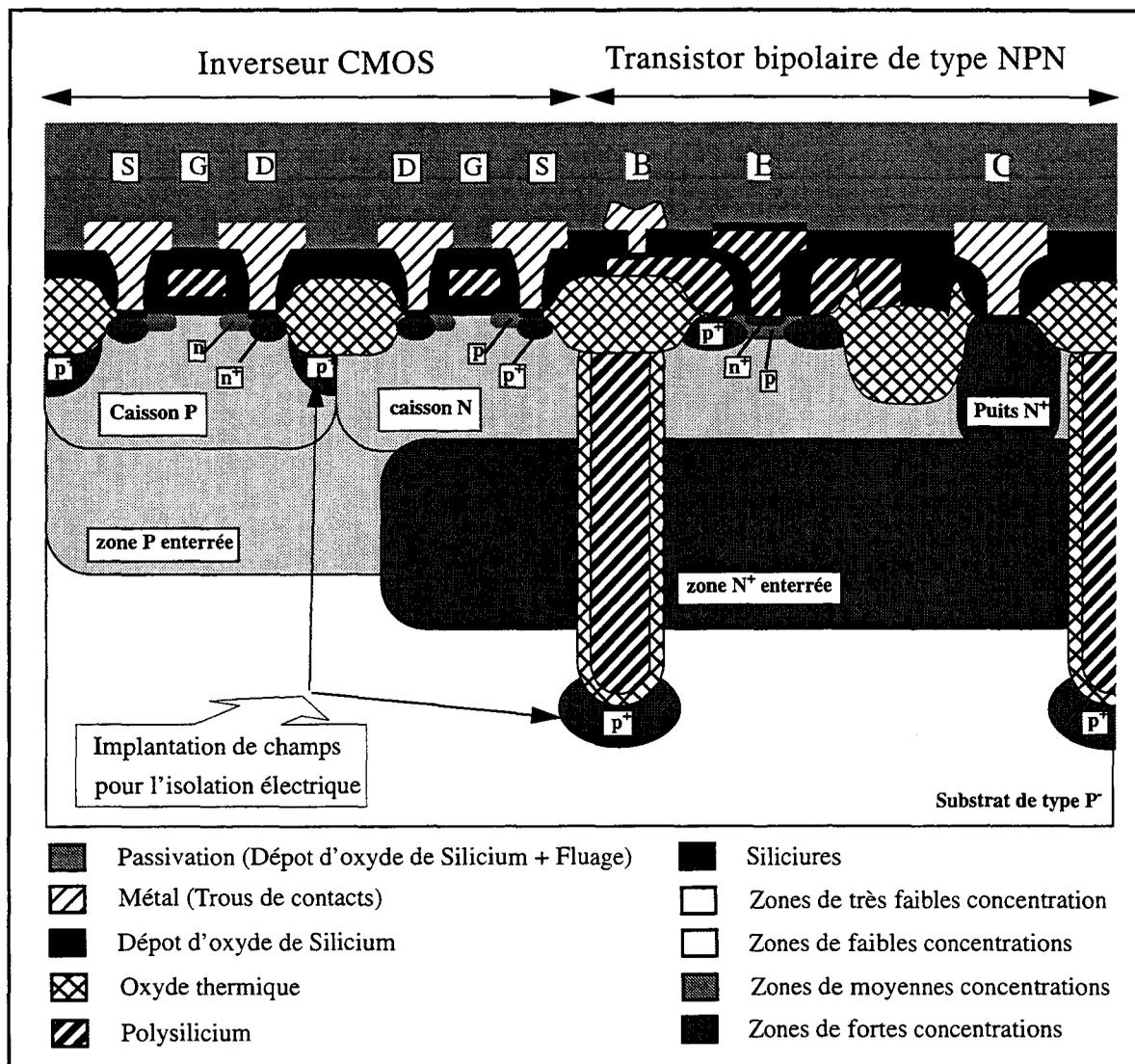


Figure 1 : Coupe schématique d'un dispositif BICMOS avancé.

Cette structure regroupe quelques-unes des améliorations technologiques déjà citées, à savoir : 1) l'utilisation du polysilicium et de siliciures pour réduire les résistances d'accès et les capacités parasites, 2) la non-uniformité des dopages des zones de source et drain afin d'éviter la génération d'électrons chauds, 3) l'introduction de la technologie "Double Poly" afin d'augmenter la densité d'intégration et finalement 4) l'isolation des transistors bipolaires par tranchée. Si l'on regarde maintenant ce dis-

positif du point de vue de son isolation, on s'aperçoit qu'elle possède un rôle majeur dans la détermination de sa structure. La table I liste l'ensemble des constituants du dispositif ayant à la fois un rôle dans les performances du composant actif et un rôle dans son isolation.

Table I : Rôles des constituants d'un dispositif BICMOS en termes de performances et d'isolation.

| | Rôles dans l'isolation | Rôles dans les performances |
|--------------------------------|---|---|
| Substrat P faiblement dopé | / | Réduction des capacités parasites entre substrat et zones diffusées. |
| Couche enterrée N ⁺ | Réduction des risques de latch-up. | Réduction de la résistance Collecteur. |
| Couche enterrée P | Amélioration de la tension de perçage entre collecteurs voisins. Réduction des risques de latch-up. | Diminution de l'espacement minimal entre couches enterrées N ⁺ . |
| Caisson N | Amélioration de la tension de perçage S/D du PMOS. Augmentation de la tension d'avalanche Collecteur/Base. | Augmentation de la fréquence de coupure du bipolaire. Réduction de la capacité de jonction des zones S/D du PMOS. Minimisation de l'effet substrat. |
| Caisson P | Amélioration de la tension de perçage S/D du NMOS. | Réduction de la capacité de jonction des zones S/D du NMOS. Minimisation de l'effet substrat. |
| Zone de S/D (structure LDD) | Amélioration de la tension de perçage S/D des MOS. | Diminution de la génération d'électrons chauds. |
| Base | Amélioration de la tension de perçage Collecteur/Emetteur. Augmentation de la tension d'avalanche Emetteur/Base. | Augmentation de la fréquence de coupure du bipolaire. |
| Emetteur | / | Augmentation de la fréquence de coupure du bipolaire. |

| | Rôles dans l'isolation | Rôles dans les performances |
|-----------------------|--|---|
| Collecteur | Augmentation de la tension d'avalanche Collecteur/Base. | Réduction de la résistance Collecteur. |
| Implantation de champ | Réduction des phénomènes de perçage. | / |
| LOCOS | Inopérabilité des transistors MOS parasites (entre S/D et caissons). Amélioration de la tension de perçage entre S/D et caissons. | / |
| LOCOS enterré | Augmentation de la tension d'avalanche Collecteur/Base. | Diminution de la capacité Base/Collecteur. |
| Tranchée | Réduction des phénomènes de perçage entre couches enterrées via le substrat faiblement dopé. | Augmentation de l'intégration. Diminution de la capacité Collecteur/Caisson P. |

On constate que la plupart des zones diffusées participent à l'isolation et, réciproquement, la qualité des structures d'isolation par oxyde augmente les performances des dispositifs. C'est pourquoi, dans le but d'obtenir des performances accrues, l'amélioration de l'isolation latérale des transistors a été remarquable depuis l'invention des circuits intégrés par J.S. Kilby en 1959.

2. HISTORIQUE DES STRUCTURES D'ISOLATION LATÉRALES

Le principe qui a initialement dicté cette évolution est donc l'augmentation de la densité d'intégration des composants qui est favorisée non-seulement par la diminution de taille des zones actives mais également par celle des zones de champ comme nous le montre la figure 2. L'évolution historique de la longueur minimale (W_{minimal} défini en figure 3) des dispositifs d'isolation est rapportée en figure 2a. Le graphique 2b visualise l'évolution du rapport de surface de l'isolation par rapport à la surface totale d'un dispositif. Inséré en figure 2b, le layout, paramétré en fonction de la

longueur de grille (L) et la largeur de l'isolation (W), a été choisi comme référence pour le calcul des surfaces. On s'aperçoit qu'avec les technologies VLSI, la technique de tranchée a permis de réduire la part de surface occupée par l'isolation par rapport à la surface totale. La tendance inverse s'observe pour les dispositifs isolés par oxyde épais, indiquant la nécessité toujours actuelle d'améliorer ce procédé.

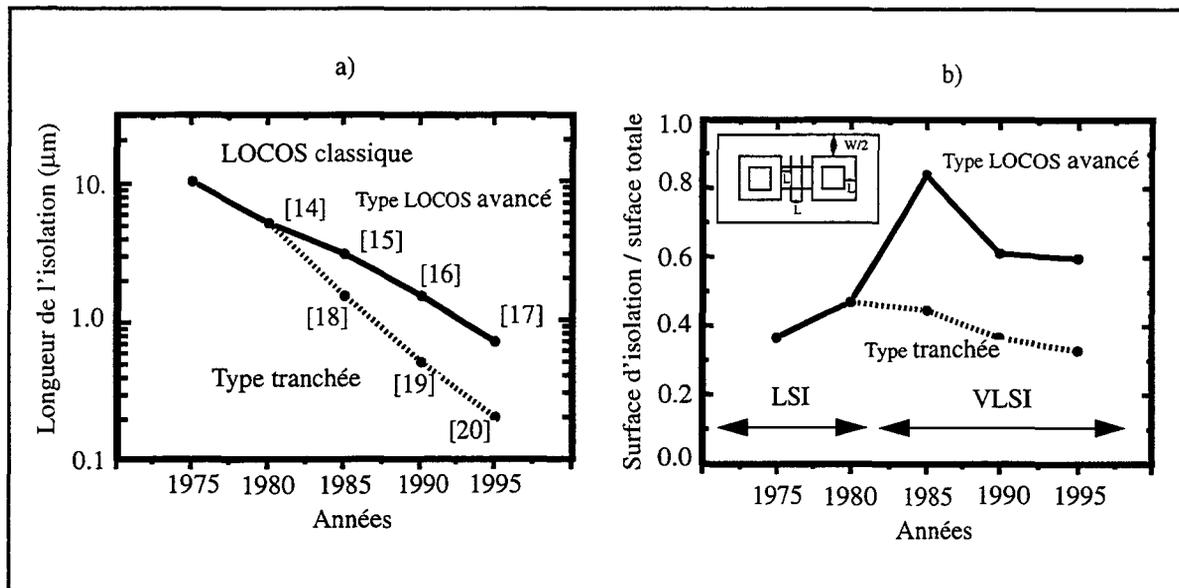


Figure 2 : Evolution historique des dimensions des dispositifs d'isolation : a) longueur de l'isolation, b) rapport de la surface d'isolation sur la surface totale du dispositif.

Technique première de l'isolation des circuits monolithiques, l'isolation par jonction a été remplacée par l'isolation par diélectrique. La technique la plus simple est appelée LOCOS (LOCAl Oxidation of Silicon) [21]. Elle consiste à protéger les zones actives du circuit par un masque (bicouche oxyde/nitride) et à procéder à l'oxydation du substrat afin de faire croître un oxyde épais de silicium (figure 3). Cependant cette technique possède un inconvénient majeur : elle n'empêche pas la diffusion des agents oxydants sous le masque et donc la création d'une zone de transition entre le dispositif actif et l'oxyde épais, communément appelée "bec d'oiseau". De l'ordre de l'épaisseur de l'oxyde épais, ce bec d'oiseau limite l'intégration des composants.

Dans un premier temps, pour pallier cet handicap, les épaisseurs d'oxyde épais ont été réduites au prix d'une implantation de champ supplémentaire, à haute dose, sous l'oxyde. Mais son influence néfaste sur les caractéristiques électriques des

transistors (effet canal étroit, augmentation des capacités parasites) n'a pas permis de résoudre complètement le problème.

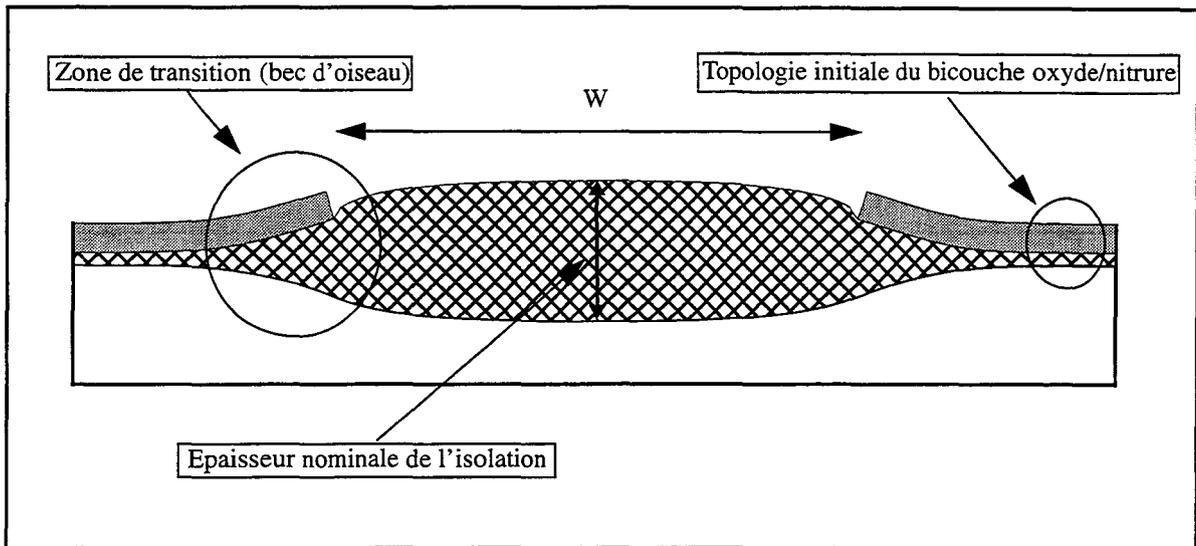


Figure 3 : Isolation latérale par oxyde épais dite LOCOS.

On a alors cherché à développer de nouvelles techniques d'isolation générant peu ou pas d'empiétement d'oxyde sur la zone active. Citons la technique, dite de "direct moat", qui consiste à déposer uniformément un oxyde épais sur l'ensemble de la surface du silicium et à le graver pour former les zones actives (figure 4a) [22].

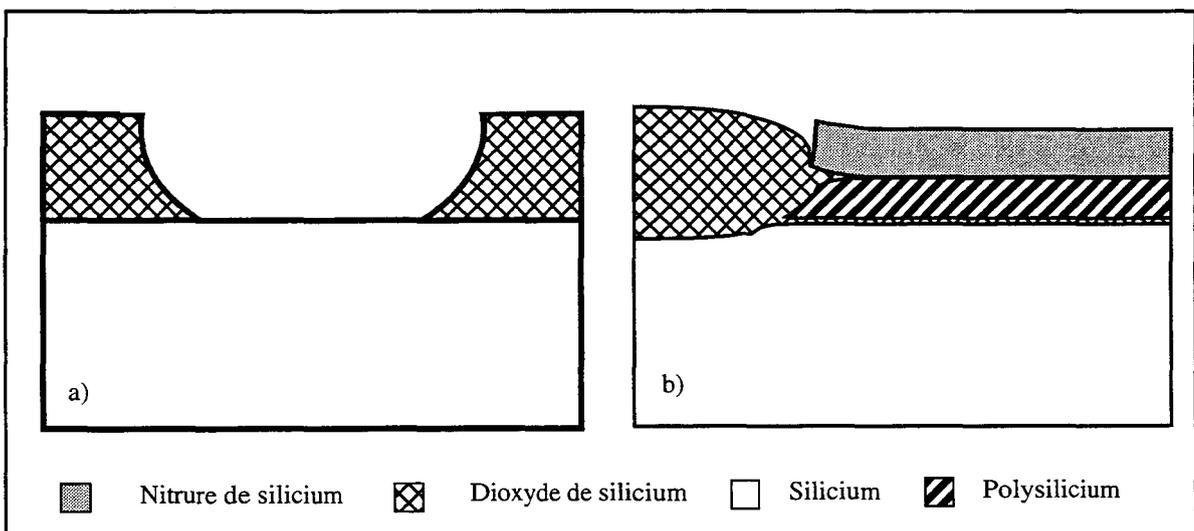


Figure 4 : Procédés d'isolation a) "direct moat" et b) SEPOX.

Une autre technique d'isolation appelée "SEPOX" est basée sur l'oxydation sélective d'un silicium polycristallin déposé uniformément sur une couche d'oxyde (figure 4b) [23].

Bien que ces deux techniques possèdent un potentiel d'intégration plus élevé que le LOCOS, elles ont néanmoins un grand inconvénient qui est de générer des surfaces non-planes qui posent des problèmes (lithographie, masquage) pour les couches supérieures.

Par conséquent, en parallèle, une autre approche a été menée visant à améliorer la qualité du masque d'oxydation du LOCOS conventionnel. Deux solutions ont été apportées : la technique dite "Poly Buffer LOCOS" (PBL) qui permet de rigidifier le masque par le biais d'une couche de nitrure plus épaisse sans générer de défauts cristallins dans le substrat grâce à l'insertion d'une couche de polysilicium entre le piédestal d'oxyde et la couche de nitrure (figure 5a) [24]. Contrairement à la structure SEPOX, la couche polycristalline est gravée au même titre que le nitrure afin d'oxyder directement le substrat. La seconde solution est appelée "Sealed Interface Local Oxidation" (SILO) et consiste à effectuer un scellement parfait du masque d'oxydation avec le substrat de silicium (figure 5b) [25, 26]. Le bon comportement de ces deux dispositifs avec le micro-dimensionnement et la réduction des tensions d'alimentation en font de sérieux candidats pour l'isolation des circuits logiques CMOS et BICMOS aux règles de dessin inférieures à 0.35 micron [17].

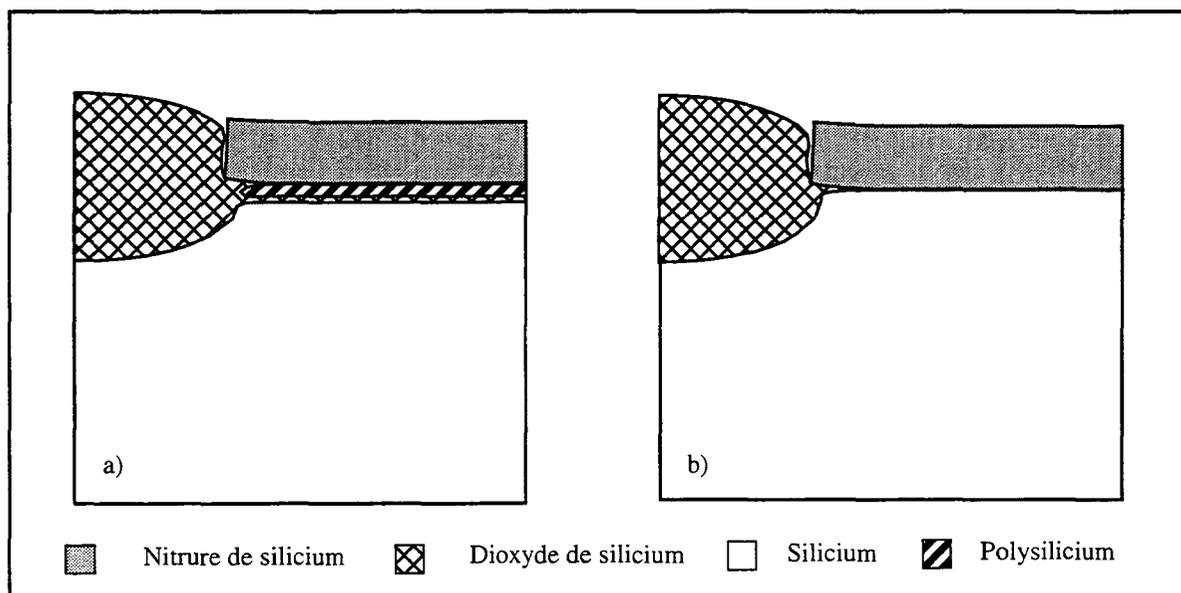


Figure 5 : Amélioration du procédé LOCOS : a) introduction d'un buffer de polysilicium et épaisseur du masque de nitrure (PBL), b) Scellement parfait de l'interface Si/SiO₂ (SILO).

REMARQUE : Pour des règles de dessin inférieures au quart de micron, la réduction des tensions d'alimentation à 2.5Volts, permet de réduire l'épaisseur nominale de l'oxyde de champ (#350nm), ce qui a pour conséquence de permettre à nouveau l'intégration du LOCOS classique, dont l'élaboration possède le grand avantage d'être beaucoup plus simple que ceux des PBL et SILO [27].

Le second principe qui a dicté l'évolution des dispositifs d'isolation est l'amélioration de la qualité de l'isolation électrique pour des dispositifs actifs très exigeants tels que les transistors bipolaires et les composants de puissance. Il a été montré que plus le diélectrique est enterré profondément dans le substrat meilleure est l'isolation électrique [28]. Cette amélioration par effet géométrique est appelée effet de "coin". Le LOCOS et ses améliorations (PBL, SILO) ont donc été modifiés par l'ajout d'une étape de gravure du silicium (figure 6) [29].

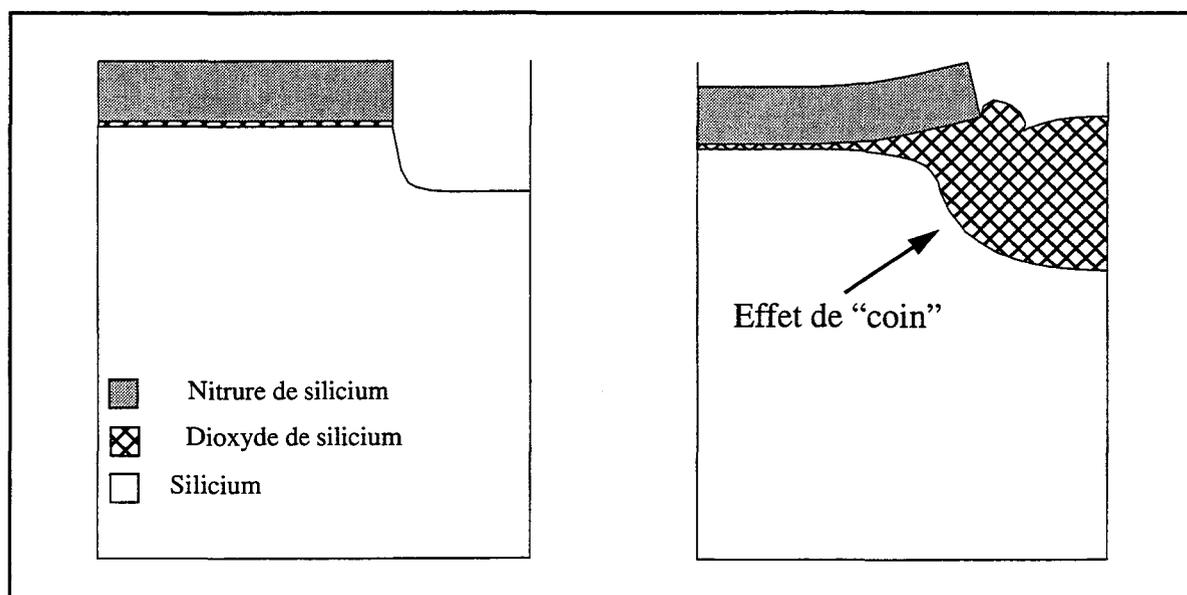


Figure 6 : LOCOS enterré : structure initiale et après oxydation.

De plus, la protection des flancs de cette gravure par un masque - la structure est appelée SideWall Masked Isolation ou SWAMI - a permis d'éliminer presque complètement la formation du bec d'oiseau (figure 7). Mais ces structures enterrées souffrent d'un inconvénient majeur : elles nécessitent l'oxydation thermique de surfaces fortement non-planes et sont donc susceptibles de générer une grande densité de défauts cristallins. De plus, lorsque la longueur des dispositifs d'isolation devient inférieure au micron, un amincissement de l'oxyde thermique apparaît et détériore l'isolation.

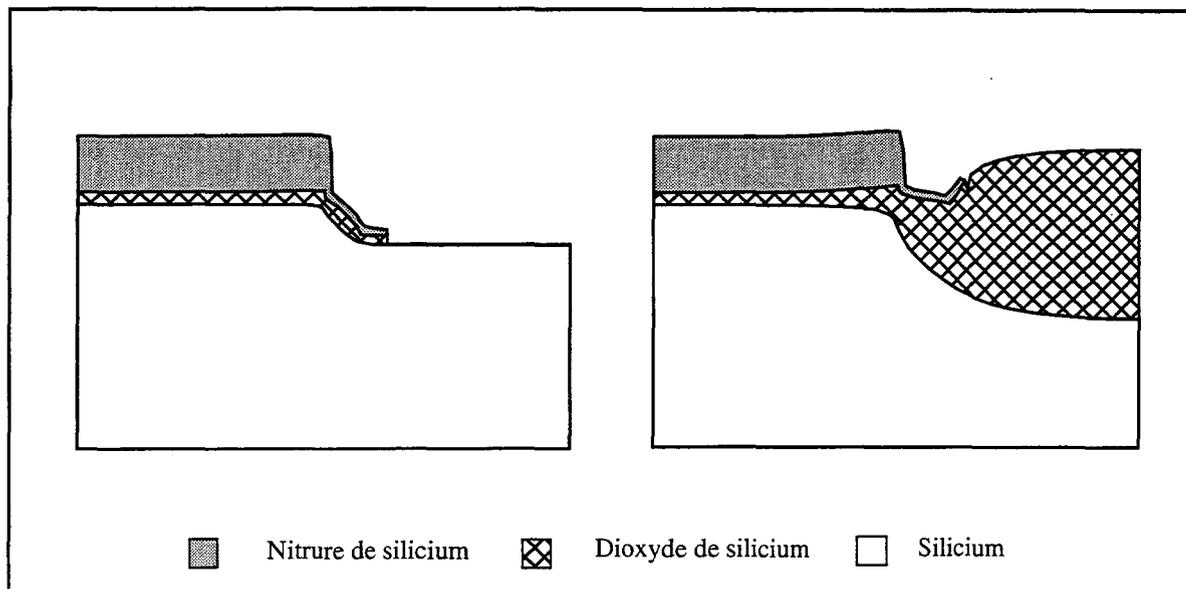


Figure 7 : Procédé SWAMI : LOCOS enterré + Masquage des flancs.

Par conséquent, le remplissage de puits peu profonds par le dépôt d'un oxyde de silicium - procédé BOX (Buried OXide) - apparaît comme la solution d'avenir puisqu'elle permet à la fois d'obtenir d'épaisses couches d'oxyde, totalement enterrées, sans bec d'oiseau quelque soit la largeur de l'isolation [30]. En contrepartie, le prix à payer est une augmentation de la complexité du procédé comparativement à la technique du LOCOS. Si l'on souhaite diminuer à l'extrême la largeur de ces puits, il faut en augmenter leur profondeur pour maintenir une largeur effective d'isolation suffisante. Il s'agit alors de la technique de "tranchée" (figure 8) [31 et 32]. Elle consiste à graver une rainure étroite et profonde dans le substrat que l'on remplit d'un diélectrique. Le plus souvent, il est composé d'une fine couche d'oxyde thermique et de polysilicium non dopé. Après planarisation, une oxydation thermique supplémentaire vient couvrir la structure. Si l'isolation par tranchée apparaît comme idéale - augmentant les performances du dispositif actif et réduisant la surface inactive - elle présente cependant un très sérieux problème. Sa fabrication génère de nombreux défauts cristallins qui créent de nouveaux courants de fuites. Pour éviter ces défauts, il faut optimiser la forme de la tranchée et les cycles thermiques nécessaires à son élaboration.

Néanmoins, il apparaît que la combinaison de la technique de tranchée avec celle du LOCOS ou du BOX va s'imposer comme le standard d'isolation pour les composants bipolaires de haute performance [17, 33 et 34].

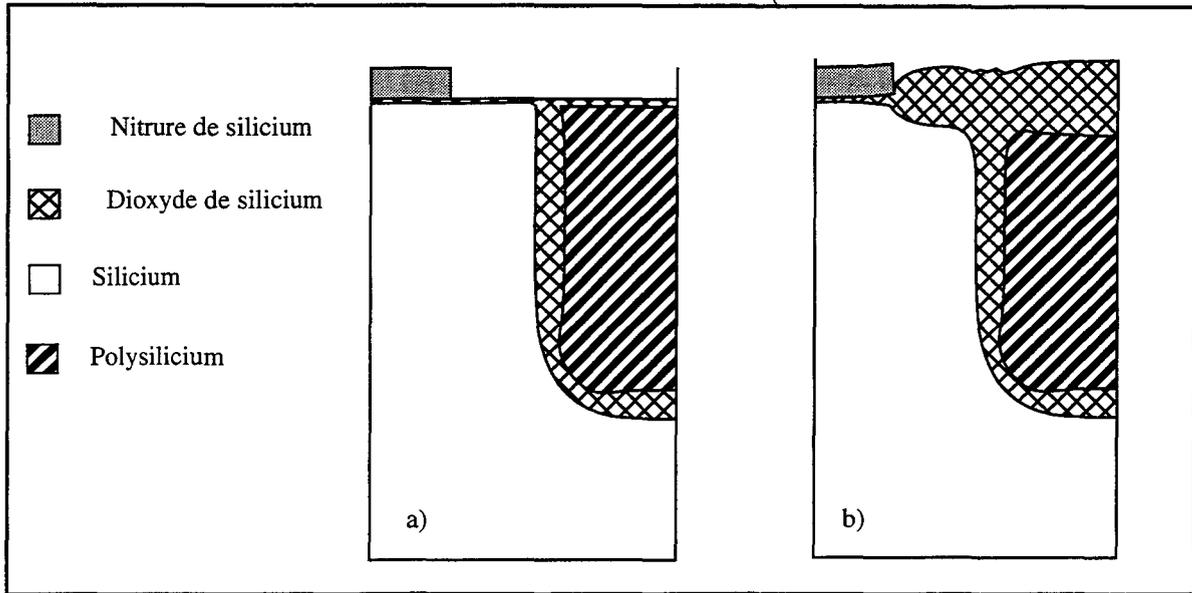


Figure 8 : Isolation par Tranchée : a) structure après oxydation thermique de l'interface et remplissage par du polysilicium, b) structure finale après réoxydation de surface.

Enfin citons deux procédés qui conceptuellement procurent une isolation totale des dispositifs mais qui à l'heure actuelle ne sont pas encore arrivés à maturité pour être introduits en production. Il s'agit de la croissance épitaxiale sélective (SEG ou Selective Epitaxial Growth) [35] et le procédé SIMOX (Separation by IMplanted OXYgen) (figure 9) [36].

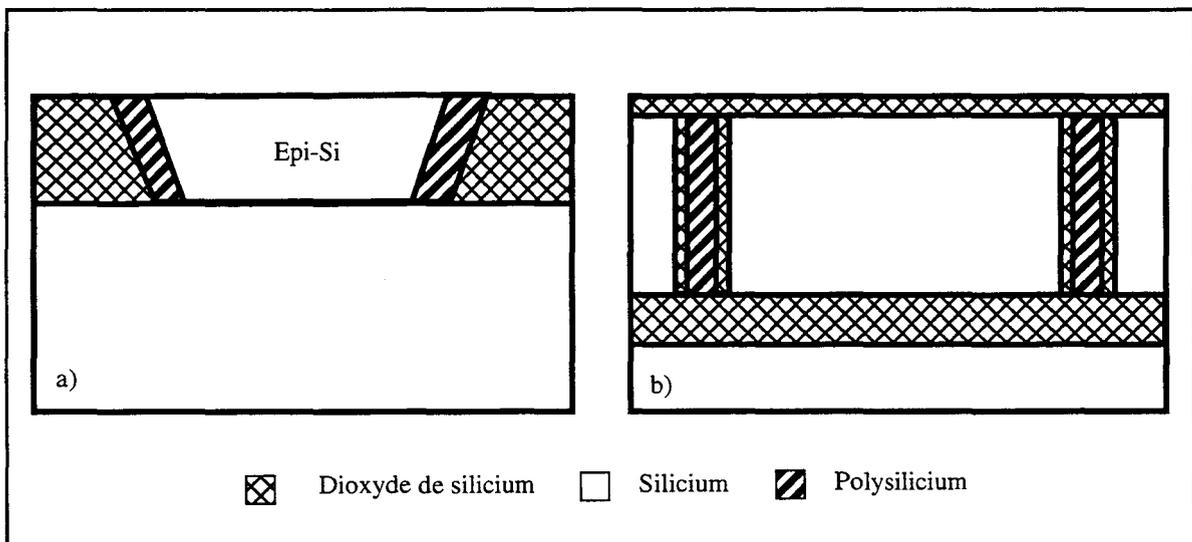


Figure 9 : Procédés a) S.E.G. et b) S.I.M.O.X.

Dans le premier cas, les zones actives sont réalisées par une croissance épitaxiale localisée dans des puits gravés à travers l'oxyde de silicium. La seconde approche consiste à créer une couche enterrée de dioxyde de silicium par implantation d'ions oxygène sous la surface du substrat. L'isolation totale ainsi obtenue est intéressante pour les composants de puissance et les circuits à faible consommation.

A partir de cette présentation de l'historique des structures d'isolation et de l'état de l'art actuel, on peut conclure que la croissance thermique d'un oxyde de silicium reste la technique la plus utilisée et qu'elle possède encore une excellente potentialité pour les circuits submicroniques. Nous allons voir dans le paragraphe suivant les règles qui régissent la conception d'un dispositif d'isolation.

3. REGLES DE CONCEPTION D'UN DISPOSITIF D'ISOLATION

La réalisation d'un dispositif d'isolation par diélectrique a pour objectif de minimiser les courants de fuites entre composants actifs. Les performances de cette isolation conditionnent la fiabilité et la durée de vie du circuit. La qualité cristalline du substrat est le facteur essentiel d'une bonne isolation. Elle dépend du niveau de contraintes mécaniques générées dans la structure. En effet, à partir d'un certain niveau de contraintes - dépendant de nombreux facteurs dont l'historique des cycles thermiques - un substrat de silicium se détériore et produit des dislocations cristallines, synonymes de dysfonctionnements électriques. La création de contraintes mécaniques dans le substrat possède de multiples origines : les chocs thermiques, le dépôt de matériaux possédant des contraintes intrinsèques et l'oxydation de surfaces non-planes. L'optimisation d'une structure d'isolation doit donc intégrer la minimisation de ces contraintes [37].

Cependant, la nécessité d'augmenter la densité d'intégration et les performances des composants impose de minimiser les surfaces occupées par les zones de champ et les zones actives. Le micro-dimensionnement des dispositifs d'isolation est obtenu par une complication de la topologie initiale qui conduit à des conditions d'oxydation fortement non-planes. Le contrôle des dimensions des dispositifs actifs est, quant à lui, réalisé par une diminution de la température des étapes de diffusion. Or, on observe que ces deux solutions entraînent une élévation du niveau de contraintes dans le substrat.

On constate que pour concevoir une isolation optimale, il est nécessaire de réaliser un compromis qui minimise la géométrie de la structure tout en conservant un niveau de contraintes mécaniques faible [38].

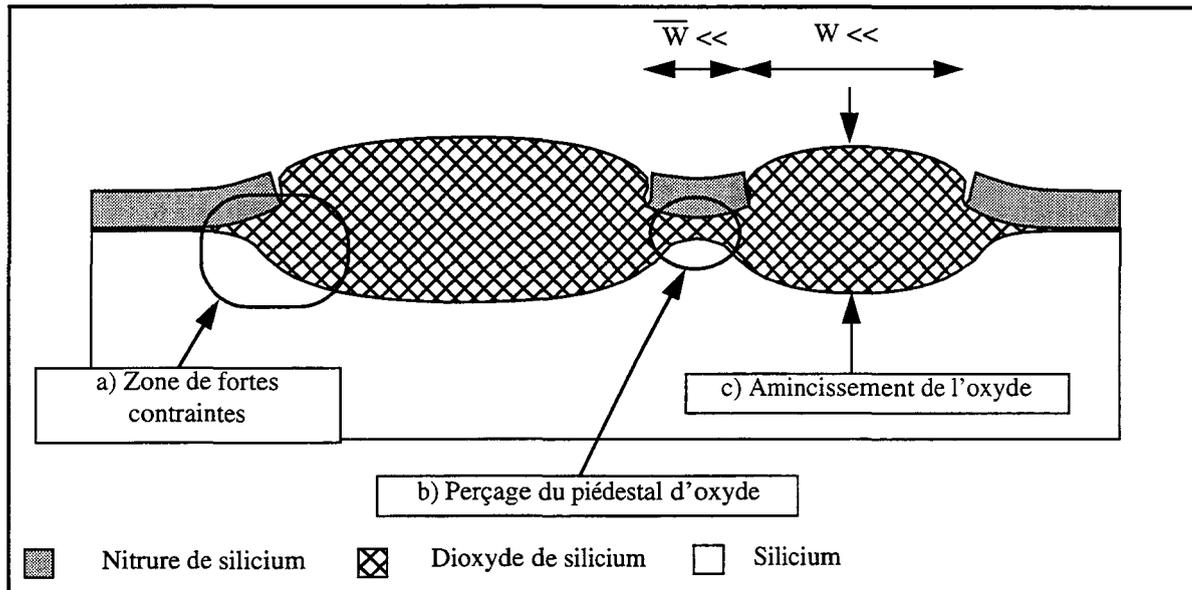


Figure 10 : Conception d'un dispositif d'isolation : visualisation et localisation des phénomènes de a) génération de contraintes mécaniques importantes b) perçage du bec d'oiseau et c) aminçissement de l'oxyde.

Pour atteindre cet objectif, on dispose de trois paramètres à optimiser :

□ Le masque d'oxydation [39]

○ Son efficacité doit permettre de supprimer le bec d'oiseau. Il faut donc que son adhérence avec le substrat soit parfaite. Mais les contraintes intrinsèques du nitrures ne permettent pas de réaliser ce scellement idéal. Il est nécessaire d'introduire, entre le substrat et le nitrures, un piedestal d'oxyde qui absorbe ces contraintes. L'optimisation du masque vise donc à minimiser l'oxydation latérale tout en minimisant les contraintes induites par le nitrures dans le voisinage du bec d'oiseau (a - figure 10). Un phénomène supplémentaire est à intégrer, conséquence directe de la miniaturisation. En effet, un perçage d'oxyde apparaît pour des bandes étroites de nitrures (b - figure 10) [40] qui ne peut être toléré puisque les zones actives doivent ensuite être gravées jusqu'au silicium afin d'éliminer toute contamination. Or, cette perte d'efficacité est fonction de la topologie du masque.

□ La topologie des zones de champ avant oxydation [41]

○Le fait d'avoir un oxyde enterré avec un angle marqué augmente la qualité de l'isolation électrique grâce à la création d'une barrière de potentiel élevée au coin de l'oxyde. De plus, cet oxyde enterré permet d'obtenir une meilleure planarité du dispositif. Il est donc profitable de graver le substrat avant oxydation. Cependant, la forme initiale du silicium accentue la non-uniformité de l'oxydation et augmente le niveau de contraintes. Pour des dispositifs miniaturisés, ceci implique une conséquence néfaste supplémentaire. En effet, le niveau élevé des contraintes altère la cinétique et provoque un amincissement de l'oxyde pour de faibles ouvertures du masque (c - figure 10) [42]. Il est nécessaire d'optimiser les paramètres géométriques de la gravure pour obtenir le meilleur compromis.

□ Les conditions d'oxydation [43]

○Elles comprennent le cycle thermique, la pression et l'ambiance d'oxydation. Chacune de ces conditions a le pouvoir de modifier les propriétés mécaniques des matériaux utilisés dans la fabrication des circuits intégrés. Plus ces derniers opposeront une résistance à la déformation, plus le niveau de contraintes augmentera dans la structure mais, à contrario, meilleur sera le contrôle des dimensions.

L'analyse de ces compromis nous montre que pour mettre au point une isolation par oxyde épais, il est nécessaire de posséder une bonne compréhension physique de la cinétique d'oxydation et des propriétés mécaniques des matériaux de fabrication, afin de définir une structure géométrique optimale. Il est évident que l'expérimentation systématique est longue, complexe et très coûteuse étant donné le grand nombre de paramètres à intégrer. Par conséquent, l'utilisation d'outils de simulation se révèle indispensable.

4. LA SIMULATION NUMERIQUE DE TECHNOLOGIES SILICIUM

La simulation de technologie prédit, à partir de la description des étapes de fabrication et des masques, la structure physique du composant : topologie, extensions géométriques, dopages et contraintes mécaniques.

Etant donné la complexité des structures submicroniques et les conditions extrêmes de leur fabrication (faible profondeur d'implantation, temps de recuit minimal, basse température, ...) cet outil doit pouvoir prendre en compte des topologies complexes multicouches et modéliser avec précision les procédés de dépôt, lithographie, gravure, diffusion et oxydation [44]. Historiquement, les premiers travaux de modélisation ont porté sur les étapes d'implantation, de diffusion et d'oxydation (1979, SUPREM II - Stanford), ce qui explique qu'actuellement, la connaissance des phénomènes physiques de ces trois procédés soit la plus avancée et que les modèles numériques correspondants, implantés dans les simulateurs standards SUPREM IV (Stanford), FEDSS (IBM), CREEP (Berkeley), PROPHET (ATT), STORM (Projet ESPRIT) et IMPACT-4 (ISEN) soient très sophistiqués [45, 46, 47, 48 et 49] :

Implantation

- Détermination des profils implantés par modélisation statistique (Monte Carlo).
- Modélisation des défauts créés dans le silicium par l'implantation (défauts ponctuels et étendus, zones amorphisées, dislocations, ...).

Diffusion

- Contribution des défauts du silicium à la diffusion des dopants.
- Diffusion en fortes concentrations et phénomènes de précipitation [50].
- Effets des contraintes mécaniques sur la cinétique de diffusion.

Oxydation

- Effets des contraintes mécaniques sur la cinétique d'oxydation.
- Modélisation rhéologique des matériaux et des couches fines.
- Modélisation de la génération de dislocations par le mécanisme d'oxydation.

Les objectifs de la simulation de technologie sont de :

- Minimiser le nombre d'expériences nécessaires à la mise au point et à l'optimisation d'un procédé de fabrication ou d'une filière technologique.
- Diagnostiquer la nature d'un dysfonctionnement électrique ou d'une dégradation des caractéristiques d'un circuit.

□ Modéliser macroscopiquement les phénomènes physiques et améliorer le niveau de connaissance des mécanismes qu'ils mettent en jeu afin d'augmenter le champ de prédiction des simulateurs.

La capacité à remplir ces objectifs dépend de différentes caractéristiques :

□ La fiabilité et le champ d'application du simulateur.

□ Le degré de sophistication des modèles.

□ L'efficacité numérique : le compromis précision des résultats/temps de calcul est très important pour les exploitations industrielles.

□ La facilité d'utilisation : l'intégration actuelle des simulateurs dans des environnements de travail structurés et conviviaux - Virtual Fab (Silvaco), Caesar (TMA) - doit permettre une expansion du marché des simulateurs de technologies et une intensification des campagnes de simulation.

□ La capacité d'interfaçage avec d'autres outils informatiques.

□ La capacité d'évolution permettant d'introduire des modèles plus évolués et de nouvelles technologies (ex : Siliciuration).

Un état de l'art actuel fait apparaître que la simulation de technologies n'est pas encore arrivée à maturité. De trop grandes lacunes existent encore entre le pouvoir de prédiction des simulateurs et la réalité expérimentale. De ce fait, des recherches sont toujours activement menées autour de la modélisation quantitative des mécanismes physiques intervenant dans la fabrication des circuits intégrés. De plus, la miniaturisation des composants a montré la nécessité d'une analyse multidimensionnelle, et l'extension en 3D des simulateurs de technologie est un sujet d'actualité qui, malgré la puissance de l'informatique, reste un grand challenge.

5. ORGANISATION DU MANUSCRIT

Le travail qui est présenté dans ce manuscrit contribue à la modélisation du phénomène d'oxydation thermique du silicium. L'objectif est de développer et de

calibrer un outil numérique permettant de calculer la distribution des contraintes mécaniques créées par le processus d'oxydation au sein de l'ensemble des matériaux composant un dispositif intégré. Les algorithmes numériques qui ont été mis au point constituent une première étape vers le calcul mécanique systématique permettant aux simulateurs de technologies de calculer l'évolution spatiale et temporelle des champs de contraintes au même titre que celle des dopages. L'ensemble du modèle est implanté dans le simulateur de technologies multicouches IMPACT-4 [49].

La présentation des résultats obtenus dans le cadre de cette thèse s'articule en quatre chapitres. Le chapitre II expose le niveau de connaissance actuel du mécanisme d'oxydation thermique du silicium et rappelle brièvement l'historique de sa modélisation : modèles unidimensionnels, 2D analytiques et multidimensionnels numériques. Son apport original est la description d'une approche pseudo-analytique du problème qui étend le champ d'application des modélisations analytiques classiques tout en conservant des temps de calcul réduits. Contribution centrale du manuscrit, le chapitre III s'attache à décrire la modélisation numérique adoptée dans ce travail. Deux approches sont développées : la première permet de calculer avec exactitude les profils d'isolation pour des structures de type LOCOS pour lesquelles le matériau oxydé n'est pas déformé. La seconde, plus générale et plus physique, s'applique à tout type d'isolation et fournit une carte complète des contraintes mécaniques dans l'ensemble de la structure. Plusieurs exemples permettent : 1) d'évaluer l'efficacité numérique des algorithmes, 2) de constater le bon accord de la simulation avec les résultats expérimentaux et 3) de comparer les deux solutions numériques. Le chapitre IV analyse les contraintes générées pendant l'oxydation et leur dépendance par rapport aux conditions expérimentales (température, pression, ambiance) et par rapport à la nature mécanique des matériaux (élastique, visqueuse ou viscoélastique). La calibration des lois rhéologiques non-linéaires de l'oxyde et du nitrure de silicium y est également exposée. Pour conclure, une étude met en évidence les domaines de validité respectifs des lois non-linéaires des comportements visqueux et viscoélastiques. Enfin, le cinquième chapitre illustre les capacités de prédiction du modèle au travers de différentes applications : l'optimisation d'un LOCOS enterré pour une technologie BICMOS $0.8\mu\text{m}$, l'analyse de structures avancées telles le SILO et le PBL. Enfin, la simulation des caractéristiques électriques d'un transistor MOS parasite à l'aide du simulateur de dispositif IMPACT-3 permet une ultime validation de la simulation de technologies et illustre le couplage indispensable qui doit exister entre ces deux activités.

Chapitre 1

Références bibliographiques

- [1] K. Hashimoto and M. Kashiwagi, "ULSI Research and Development in JAPAN", Proceedings of the Fourth International Symposium on Ultra Large Scale Integration Science and Technology, p. 30, 1993.
- [2] R.B. Fair, "Challenges to Manufacturing Submicron, Ultra-Large Scale Integrated Circuits", Proceedings of the IEEE, vol. 78, no. 11, p. 1685, November 1990.
- [3] S. Wittekoek, "Optical Lithography : Present Status and Continuation below 0.25 μ m", Microelectronic Engineering, vol. 23, p. 43, 1994.
- [4] C.A. Warwick, "Toward Giga-Scale Silicon Integrated Circuits", Microelectronic Engineering, vol. 23, p. 57, 1994.
- [5] G. R. Wilson, "Advances in Bipolar VLSI", Proceedings of the IEEE, vol. 78, no. 11, p. 1707, November 1990.
- [6] E.A. Sack, "Consumer Electronics : an Important Driver of Integrated Circuit Technology", Proceedings of the IEEE, vol. 82, no. 4, p. 465, April 1994.
- [7] P. K. Chatterjee, "ULSI CMOS - The Next Ten Years", Proceedings of ESSDERC'92, vol. 19, p. 3, 1992.
- [8] H. Iwai, "CMOS Device Architecture and Technology for the 0.25 Micron to 0.025 Micron Generations", Proceedings of ESSDERC'93, p. 513, 1993.

- [9] M. Ogirima, "Process Innovation for Future Semiconductor Industry", 1993 Symposium on VLSI Technology-Kyoto, p. 1, May 1993.
- [10] G. J. Hu, "A Better Understanding of CMOS Latch-up", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 31, no. 1, p. 62, January 1984.
- [11] M. Roche, "BICMOS : Status and Future Trends", Proceedings of ESSDERC'93, p. 701, 1993.
- [12] T. Nakamura, "Bipolar and BICMOS Devices and Circuits for ULSI", Proceedings of the Fourth International Symposium on Ultra Large Scale Integration Science and Technology, p. 55, 1993.
- [13] A. R. Alvarez, "BICMOS Technology and Applications", Kluwer Academic Publishers, chapitre 3, p. 63, 1989.
- [14] T. Wada, O. Kudoh, Y. Nagahashi and S. Matsue, "A 15-ns 1024-bit fully static MOS RAM", IEEE Journal of Solid-State Circuits, vol. 13, no. 10, p. 635, 1978.
- [15] R. A. Martin, A. G. Lewis, T. Y. Huang and J. Y. Chen, "A New Process for One Micron and Finer CMOS", Proceedings of the IEDM 85, p. 403, 1985.
- [16] M. E. Diwany, M. Brassington, R. Razouk, P. v. Wijnen and V. Akyilas, "Low Voltage Performance of an Advanced CMOS/BICMOS Technology Featuring 18 GHz Bipolar f_T and sub-70ps CMOS gate Delays", Proceedings of the IEDM 90, p. 489, 1990.
- [17] S. Deleonibus, "Field Isolation for the Gigabit Era Devices", Proceedings of ESSDERC'93, p. 391, 1993.
- [18] M. Vora, Y.L. Ho, S. Bhamre, F. Chien, G. Bakker, H. Hingarh and C. Schmitz, "A sub-100 picosecond Bipolar ECL Technology", Proceedings of the IEDM 85, p. 34, 1985.
- [19] E. Bertagnolli, K. Ehinger, H. Klose, J Weng and D. Hartwig, "Modular Deep Trench Isolation Scheme for 38 GHz Self-Aligned Double Polysilicon Bipolar Devices", Proceedings of the Bipolar Circuits and Technology Meeting, p. 25, 1991.
- [20] H. Inokawa, Y. Yamamoto, Y. Okazaki, T. Kobayashi, M. Miyake and H. Ishii, "Ultra narrow Trench-isolated 0.2 μm CMOS and its Application to Ultra-power Frequency Dividers", Proceedings of the IEDM 93, p. 887, 1993.
- [21] J.A. Appels, E. Kooi, M.M. Paffen, J.J.H. Schatorje and W.H.C.G., "Local Oxidation of Silicon and its Application in Semiconductor Device Technology", Philips Research Rep., vol. 25, p. 118, 1970.
- [22] K. L. Wang, S. A. Saller, W. R. Hunter, P. K. Chatterjee and P. Yang, "Direct Moat Isolation for VLSI", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 29, no. 4, p. 541, April 1982.

- [23] N. Matsukawa, H. Nozawa, J. Matsunaga and S. Kohyama, "Selective Polysilicon Oxidation Technology for VLSI Isolation", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 29, no. 4, p. 561, April 1982.
- [24] M. Ghezzi, E. Kaminsky, Y. Nissan-Cohen, P. Frank and R. Saia, "LOPOS: Advanced Device Isolation for 0.8 μm CMOS/Bulk Process Technology", Journal of the Electrochemical Society, vol. 136, no. 7, p. 1992, 1989.
- [25] P. Molle, S. Deleonibus and F. Martin, "Sealed Interface Local Oxidation by Rapid Thermal Nitridation", Journal of the Electrochemical Society, vol. 138, no. 12, p. 3732, 1991.
- [26] G. Guegan, S. Deleonibus, M. Lerme, G. Reimbold and P. Molle, "Optimisation of Isolation for 0.5 μm CMOS Technology using SILO process with R.T.N. of Silicon", Proceedings of ESSDERC'91, p. 647, 1991.
- [27] P.H. Woerlee, C.A.H. Juffermans, H. Lifka, W. Manders, H. Pomp, G. Paulzen, A.J. Walker and R. Woltjer, "A Low Power 0.25 μm CMOS Technology", Proceedings of the IEDM 92, p. 31, 1992.
- [28] S. H. Goodwin and J.D. Plummer, "Electrical Performances and Physics of Isolation Region Structures for VLSI", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 31, no. 7, p. 861, July 1984.
- [29] N. Shimizu, Y. Naito, Y. Itoh, Y. Shibata, K. Hashimoto, M. Nishio, A. Asai, K. Ohe, H. Umimoto and Y. Hirofuji, "A Poly-Buffer Recessed LOCOS Process for 256Mbit DRAM Cells", Proceedings of the IEDM 92, p. 279, 1992.
- [30] T. Shibata, R. Nakayama, K. Kurosawa, S. Onga, M. Konaka and H. Iizuka, "A Simplified BOX (Buried OXide) Isolation Technology for Megabit Dynamic Memories", Proceedings of the IEDM 83, p. 27, 1983.
- [31] K. Shibahara, Y. Fujimoto, M. Hamada, S. Iwao, K. Tokashiki and T. Kunio, "Trench Isolation with NABLA-shaped buried Oxide for 256Megabit DRAMS", Proceedings of the IEDM 92, p. 275, 1992.
- [32] H. Goto and K. Inayoshi, "Trench Isolation Schemes for Bipolar Devices: Benefits and Limiting Aspects", chapitre 4 du livre intitulé "Ultra-Fast Silicon Bipolar Technology", Springer Series in Electronics and Photonics 27, 1988.
- [33] N. Itoh, C. Yoshino, S. Matsuda, Y. Tsuboi, K. Inou, Y. Katsumata and H. Iwai, "Optimization of Shallow and Deep Trench Isolation Structures for Ultra-high-Speed Bipolar LSIs", Proceedings of the Bipolar Circuits and Technology Meeting", p. 104, 1992.
- [34] T. Park, S.T. Ahn, Y.G. Kim, J.K. Lee, M.Y. Lee and J.G. Lee, "Double Trench Isolation (DTI) : A Novel Isolation Technology for Deep-Submicron Silicon Devices", 1993 Symposium on VLSI Technology-Kyoto, p. 137, May 1993.

- [35] J.N. Burghartz, A.O. Cifuentes, J. Warnock, R.C. McIntosh, C.L. Stanis, J.D. Cressler, J.Y.-C Sun, J.H. Comfort and K.A. Jenkins, "SPIRIT - A Bipolar/BICMOS Isolation Technology for High-Performance VLSI", 1993 Symposium on VLSI Technology-Kyoto, p. 143, May 1993.
- [36] J. Weyers, H. Vogt, "A 50V Smart Power Process with Dielectric Isolation by SIMOX", Proceedings of the IEDM 92, p. 225, 1992.
- [37] Y. Katsumata, I. Katakabe, N. Itoh, E. Tsukioka, C. Yoshino and H. Iwai, "Stress Analysis of Trench Isolation Structure in Advanced Bipolar LSIs", Proceedings of the Bipolar Circuits and Technology Meeting", p. 271, 1991.
- [38] J. Hui, P. Vande Voorde and J. Moll, "Scaling Limitations of Submicron Local Oxidation Technology", Proceedings of the IEDM 85, p. 392, 1985.
- [39] P. A. van der Plas, N. A. H. Wils and R. de Werdt, "Geometry Dependent Bird's Beak Formation for Submicron LOCOS Isolation", Proceedings of ESSDERC'89, p. 131, 1993.
- [40] P. U. Kenkare, J.R. Pfister, J.D. Hayden, R. Subrahmanyam, R. I. Hegde and V. Kaushik, "Sensitivity of Field Isolation Profiles to Active Pattern", Proceedings of the IEDM 93, p. 479, 1993.
- [41] E. Bassous, H.N. Yu and V. Maniscalco, "Topology of Silicon Structures with Recessed SiO₂", Journal of the Electrochemical Society, vol. 123, no. 11, p. 1729, 1976.
- [42] T. Mizuno, S. Sawada, S. Maeda and S. Shinozaki, "Oxidation Rate Reduction in the sub-micrometer LOCOS Process", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 34, no. 11, p. 2255, April 1987.
- [43] T.-C. Wu, W.T. Stacy and K.N. Ritz, "The influence of the LOCOS Processing Parameters on the Shape of the Bird's Beak Structure", Journal of the Electrochemical Society, p. 1563, 1983.
- [44] D. Collard, "Contribution à la Simulation de Technologies et de Dispositifs Silicium", Mémoire d'habilitation à diriger des recherches, présenté à l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres-Artois, Décembre 1994.
- [45] J.D. Plummer, "Process Simulation in Submicron Silicon Structures", Proceedings of the Fourth International Symposium on Ultra Large Scale Integration Science and Technology, p. 93, 1993.
- [46] K.A. Salsburg and H.H. Hansen, "FEDSS-Finite Element Diffusion Simulation System", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 30, p. 1004, September 1983.
- [47] M.R. Pinto, C.S. Rafferty, R.K. Smith, J. Bude, "ULSI Technology Development by Predictive Simulation", Proceedings of the IEDM 93, p. 701, 1993.

- [48] S.K. Jones, C. Lombardi, A. Poncet, C. Hill, H. Jaouen, J. Lorenz, C. Lyden, K. De Meyer, J. Pelka, M. Rudan and S. Solmi, "STORM : A European Platform for Sub-Micron Technology Simulation and Optimisation", Proceedings of the ESSDERC'93, p. 505, 1993.
- [49] B. Baccus, E. Dubois, D. Collard and D. Morel, "Efficient Two Dimensional Multilayer Process Simulation of Advanced Bipolar Devices", Solid-State Electronics, vol. 32, p. 1013, 1989.
- [50] E. Vandenbossche, "Contribution à la modélisation de la diffusion des dopants en fortes concentrations dans le silicium", Thèse présentée à l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres-Artois, no. d'ordre 1391, Novembre 1994.

Chapitre 2

M odélisation

Ce chapitre rappelle les connaissances expérimentales et théoriques du mécanisme d'oxydation. Parmi les nombreux modèles unidimensionnels qui ont été proposés, celui de Deal et Grove possède une vaste gamme de validité et, à ce titre, constitue la base de la majorité des modélisations multidimensionnelles. Après avoir détaillé les limites du modèle de Deal et Grove, il est montré comment la prise en compte des déformations affectant la structure de l'oxyde permet d'améliorer la modélisation. Les différentes solutions multidimensionnelles sont brièvement exposées. Parmi celles-ci, l'approche analytique bidimensionnelle, bien que limitée à des applications simples telles que le LOCOS, possède l'avantage d'être peu consommatrice en temps de calcul. Cependant, ce type de modèle, contrairement aux modélisations purement numériques, possède une capacité de prédiction limitée. C'est pourquoi une approche mixte a été développée qui intègre les effets des contraintes sur la cinétique d'oxydation grâce à un profil analytique du champ de contraintes. Cette solution conserve l'avantage d'un temps de calcul restreint et augmente le champ d'applications du modèle analytique. Finalement, une description succincte des modèles numériques 2D et 3D conclut ce chapitre et permet de replacer le travail rapporté dans ce manuscrit dans son contexte scientifique.

L'oxydation thermique d'un substrat de silicium crée un oxyde de silicium amorphe, particulièrement stable et présentant une densité de défauts d'interface très faible. Ces deux dernières propriétés des oxydes de silicium thermiques sont à l'origine de la formidable expansion de l'industrie des circuits intégrés sur substrat sili-

cium. Il en résulte que l'oxydation thermique possède une place primordiale dans la filière Silicium. En effet, la silice possède des applications multiples : elle sert à isoler latéralement les dispositifs actifs, elle forme l'oxyde de grille dans les dispositifs MOS-FET, on l'utilise comme masque pour l'implantation et/ou la diffusion des impuretés et enfin elle permet de passiver et stabiliser des surfaces de silicium. Etant donné l'importance de cette technique, de nombreuses études ont été menées afin de comprendre le mécanisme d'oxydation et de le modéliser. Dans le paragraphe suivant, nous nous proposons de résumer l'état des connaissances de l'oxydation du silicium pour des surfaces planes (modèle unidimensionnel).

1. THEORIE DU MECANISME D'OXYDATION

1.1 L'approche de Deal et Grove

En présence d'agents oxydants (H_2O , O_2 , ...), le silicium s'oxyde et crée en surface une couche diélectrique de SiO_2 qui sépare les espèces chimiques nécessaires à la réaction. Pour que la cinétique continue à s'opérer, il faut donc que l'une et/ou l'autre des espèces diffusent à travers la couche d'oxyde. Trois possibilités sont à considérer comme l'indique la figure 1.

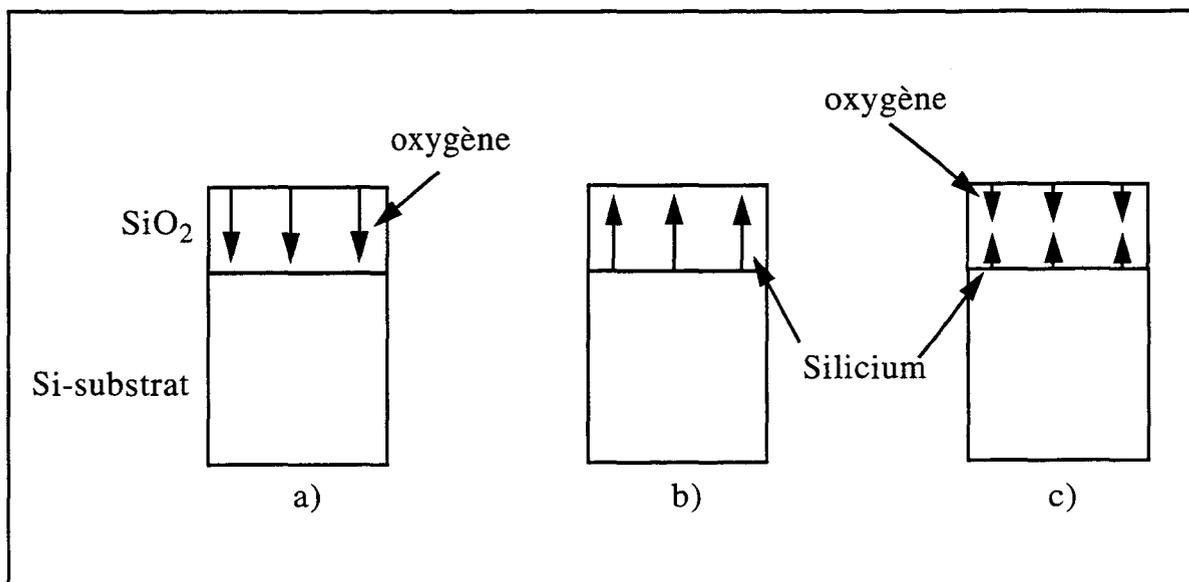


Figure 1 : Trois mécanismes possibles pour la cinétique d'oxydation pour lesquels la réaction se déroule a) à l'interface Si/ SiO_2 b) en surface du SiO_2 et 3) au sein du SiO_2 .

La figure 1(a) illustre un mécanisme où l'oxygène diffuse à travers l'oxyde pour venir réagir à l'interface Si/SiO₂, la figure 1(b) montre le cas où le silicium diffuse jusqu'à la surface de l'oxyde pour y réagir et enfin la figure 1(c) considère le cas où les deux espèces diffusent et la réaction s'opère au sein de l'oxyde. Jorgensen [1] puis beaucoup plus tard Han et Helms [2] ont montré par des méthodes différentes que l'oxygène diffuse de manière prédominante à travers l'oxyde jusqu'à l'interface Si/SiO₂ où la réaction se déroule.

Sur la base des résultats de Jorgensen, Deal et Grove [3] ont supposé que la vitesse d'oxydation était contrôlée à la fois par la diffusion de l'oxygène dans l'oxyde et le coefficient de réaction à l'interface : il s'agit de la loi "linéaire-parabolique" de croissance de l'oxyde. La figure 2 schématise ce modèle :

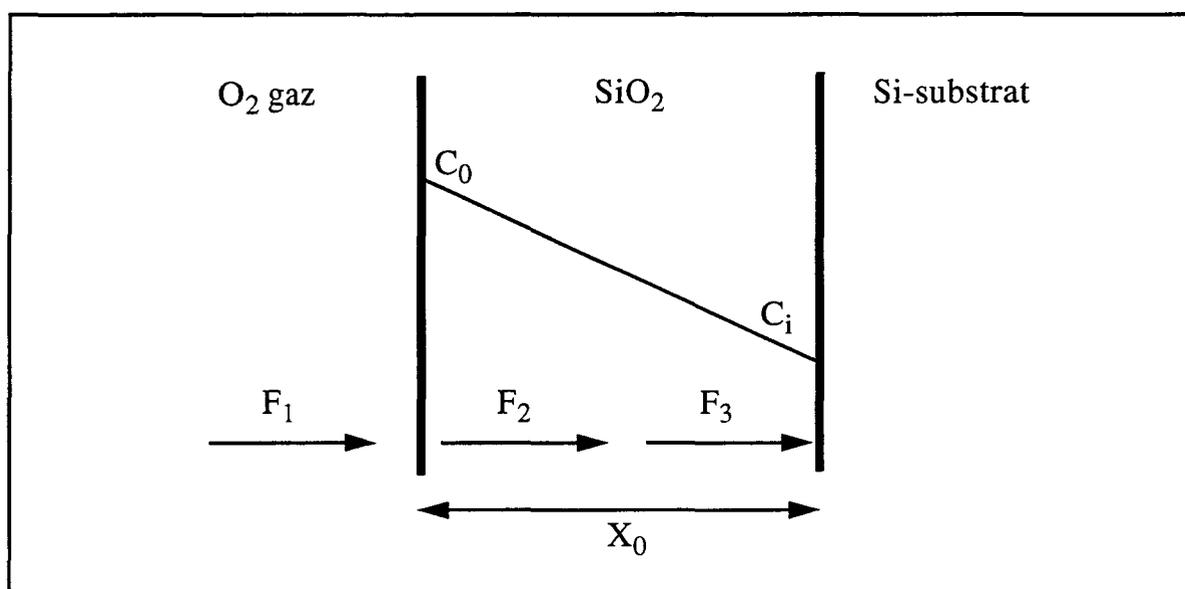


Figure 2 : Modèle unidimensionnel de Deal et Grove.

Dans le modèle de Deal et Grove, la cinétique d'oxydation est gouvernée par l'égalité de trois flux correspondant respectivement au transport, à la diffusion et à la réaction des agents oxydants. Ces différents flux sont illustrés en figure 2.

Le transport des oxydants du gaz vers la surface extérieure de l'oxyde est donné par :

$$F_1 = h (C^* - C_0) \quad (1)$$

où C^* est la concentration d'équilibre dans l'oxyde (solubilité), C_0 , la concentration à la surface de l'oxyde et h le coefficient de transfert de masse.

Le flux de diffusion des oxydants à travers l'oxyde s'exprime avec la 1^{ère} loi de Fick :

$$F_2 = -D_{\text{ox}} \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2)$$

dans laquelle D_{ox} est le coefficient de diffusion effectif et C la concentration.

Le flux de réaction à l'interface Si / SiO₂ est proportionnel à : i) la concentration C_i à cet interface, ii) la constante de réaction k_{si} :

$$F_3 = k_{\text{si}} \cdot C_i \quad (3)$$

La résolution du système donné par les équations (1, 2 et 3) conduit au modèle linéaire-parabolique de Deal et Grove dans lequel l'épaisseur d'oxyde X_0 obtenue après un temps t d'oxydation est calculée par :

$$\frac{X_0^2}{B} + \frac{X_0}{B/A} = t + \tau \quad (4)$$

Dans l'équation (4), B/A et B sont respectivement les constantes linéaires et paraboliques et τ correspond à un décalage en temps dont la valeur est déterminée en fonction de l'épaisseur initiale d'oxyde.

Les constantes sont fonction des paramètres du modèle de diffusion (Eqs. 1 à 3) et sont données par :

$$B = 2 \cdot D_{\text{ox}} \cdot C^* / N_1 \quad (5)$$

$$B/A = C^*/(N_1(1/k_{\text{si}}+1/h)) \approx k_{\text{si}} \cdot C^* / N_1 \quad (6)$$

où N_1 est le nombre de molécules d'oxydant nécessaire à la formation d'un volume unitaire d'oxyde. C^* et N_1 ne dépendent que de l'ambiance de l'oxydation. Dans l'équation (6), le terme B/A a pu être simplifié car $h \gg k_{\text{si}}$.

Les constantes linéaires et paraboliques ont été déterminées expérimentalement. Les valeurs précises de ces constantes sont disponibles [4] pour une grande gamme de températures d'oxydations sèches ou humides (800-1200°C), de pression (0.1-1 atm) et pour différentes orientations cristallines du silicium. Le domaine de validité est limité à des épaisseurs comprises entre 300 Å et 2 µm.

REMARQUE : L'équation (4) peut être simplifiée pour des valeurs extrêmes de l'épaisseur X_0 de l'oxyde :

$$1) X_0 \ll \text{ alors } X_0 = B/A \cdot (t + \tau) \quad (7)$$

L'oxydation est limitée par le coefficient de réaction à l'interface.

$$2) X_0 \gg \text{ alors } X_0^2 = B \cdot (t + \tau) \quad (8)$$

L'oxydation est limitée par le transport des agents oxydants.

Enfin, il a été montré que, sous ambiance humide, les espèces diffusantes sont les molécules d'eau [5], se déplaçant par sites interstitiels avec échanges d'atomes d'oxygène avec le réseau d'oxyde. Pour une ambiance sèche, il s'agit de molécules d'oxygène diffusant en sites interstitiels, sans aucune interaction avec le réseau d'oxyde [6, 7].

1.2 Effets des conditions expérimentales

Si le mécanisme de transport des agents oxydants semble bien établi pour les cas des ambiances humide et sèche, il n'en est pas de même pour la réaction chimique à l'interface pour laquelle les micro-mécanismes mis en jeu restent inconnus. Si l'influence de certaines conditions expérimentales sur la cinétique d'oxydation a pu être mise en évidence, sa justification théorique reste incertaine. Tout au plus, ces phénomènes ont été introduits dans le cadre du modèle de Deal et Grove par une modification des constantes linéaires et paraboliques.

Ainsi, il a été observé que les composants halogénés Cl_2 [8], HCl [9], NF_3 [10], O_2Br_2 [7] augmentent la vitesse d'oxydation. Une constatation similaire a été faite à propos de l'influence des ions Na^+ [11]. De même, la vitesse d'oxydation de substrats fortement dopés (concentration $> 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) est beaucoup plus rapide que pour un substrat standard [12].

L'oxydation d'un substrat de silicium sous l'influence d'un champ électrique a également été étudiée expérimentalement [1]. En polarisant un substrat de silicium, on s'aperçoit que la vitesse d'oxydation est inférieure au cas standard au niveau de l'électrode positive alors qu'elle est supérieure à l'électrode négative.

Enfin Irene [13] a étudié l'influence de l'orientation cristalline du silicium sur la vitesse d'oxydation. Il apparaît que la vitesse d'oxydation dépend du plan cristallin et la séquence de ces vitesses varie en fonction de l'épaisseur d'oxyde.

En résumé, bien que le modèle de Deal et Grove ait apporté une contribution significative à la compréhension de l'oxydation du silicium, il n'en reste pas moins incomplet. En particulier, le régime initial de l'oxydation sèche et les oxydations à basse température ne peuvent être expliqués, comme nous allons le voir.

1.3 Limites du modèle de Deal et Grove

1.3.1 Le régime initial de l'oxydation sèche

Des études expérimentales [14] ont montré que la vitesse d'oxydation dans le régime initial (épaisseur d'oxyde $< 300 \text{ \AA}$) en ambiance sèche est plus rapide que les prédictions du modèle. Ces divers résultats ne permettent pas d'établir une explication théorique qui fasse l'unanimité. Les spéculations sont donc toujours

d'actualité au sujet des possibles modifications du mécanisme de transport et/ou de la réaction chimique à l'interface pour expliquer ce phénomène.

Les recherches actuelles s'orientent vers une meilleure caractérisation des propriétés physiques et structurales des oxydes fins afin de définir leurs influences sur le mécanisme de transport des agents oxydants et la réaction chimique à l'interface.

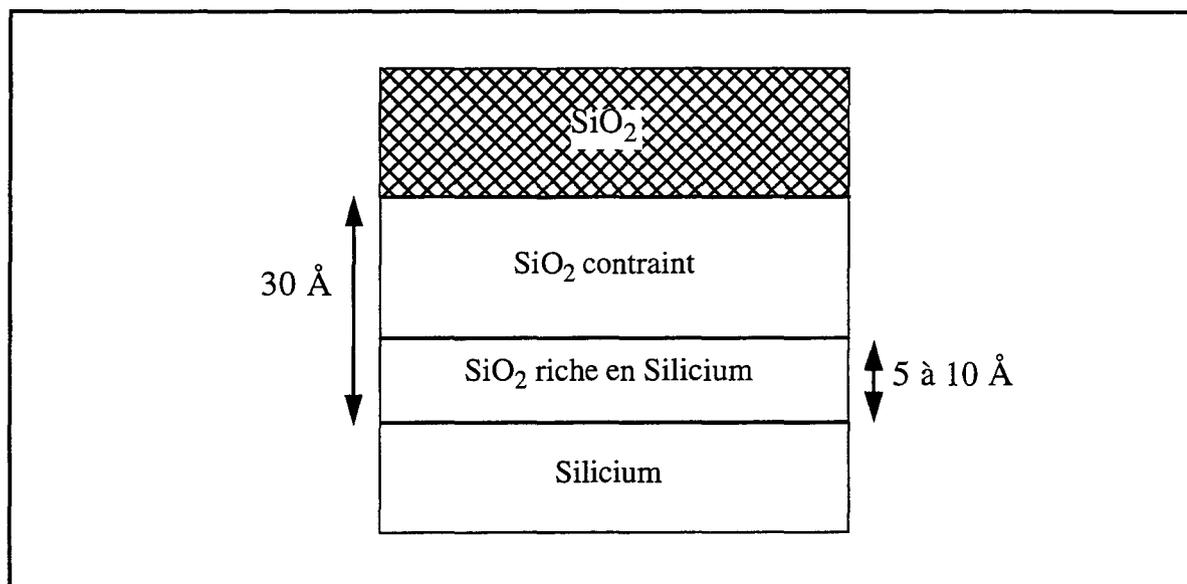


Figure 3 : Structure du dioxyde de silicium au niveau de l'interface.

En particulier, ces études s'attachent à déterminer la nature de l'oxyde au niveau de l'interface en fonction des conditions d'oxydation. En effet, il existe entre le silicium pur et l'oxyde parfaitement stoechiométrique une zone de transition, dont une des possibles topologies est donnée par la figure 3 [15].

D'autre part, Taft [16], Irene [17] et Landsberger [18] ont observé que la diffusivité des agents oxydants dans SiO₂ dépend non seulement de la température de l'oxydation mais aussi de l'état initial du film d'oxyde. Les variations de diffusivité sont attribuées aux modifications de la densité de l'oxyde. A basse température, l'oxyde croît sous un champ de contraintes en compression [19 et 20] et est plus dense qu'un oxyde dont la croissance s'est faite à haute température [21]. Cette variation de diffusivité des agents oxydants est invoquée dans certains modèles [22 et 23] pour expliquer l'augmentation de la vitesse d'oxydation observée durant le régime initial de l'oxydation sèche.

Enfin, l'existence de micropores dans les oxydes fins obtenus par oxydation sèche [24] est à la base des modèles les plus récents [25 et 26]. Ces micropores

augmenteraient la solubilité des agents oxydants dans le silicium et diminueraient le niveau de contrainte intrinsèque au niveau de l'interface, augmentant ainsi le taux de réaction.

1.3.2 Comportement anormal à basse température

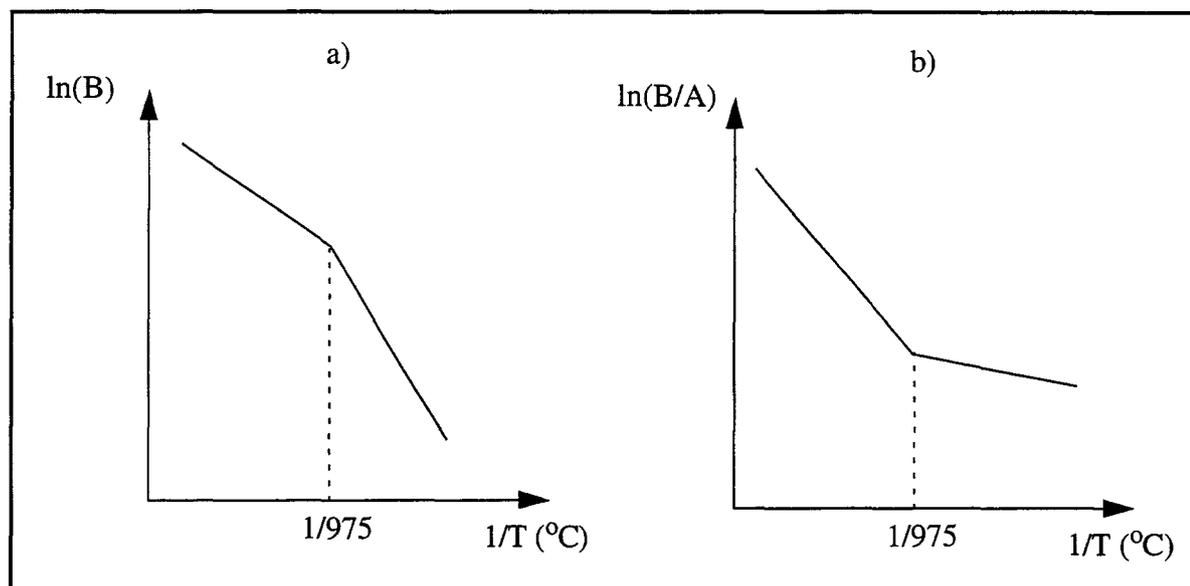


Figure 4 : Schématisation du comportement des constantes a) parabolique, b) linéaire en fonction de la température.

Des expériences par ellipsométrie in situ ont permis de révéler que, contrairement à ce qu'avaient supposé Deal et Grove, la variation des constantes linéaires et paraboliques avec la température n'est pas régit par une énergie d'activation unique. A faible température ($T < 975$ °C), la constante parabolique présente une énergie d'activation supérieure à celle déterminée par Deal et Grove (figure 4a). L'effet inverse est observé pour la constante linéaire (figure 4b) [27]. Enfin, toujours à faible température, le comportement linéaire de ces deux constantes par rapport à la pression, déterminé par Deal et Grove, ne semble plus être vérifié [28].

Ces observations traduisent un changement du mécanisme d'oxydation à faible température. Or, il est connu que les propriétés mécaniques des matériaux dépendent de la température [29]. En fonction de ces propriétés (élastique, viscoélastique ou visqueuse), les contraintes mécaniques développées dans le matériau sont différentes : à basse température, leur amplitude est importante alors qu'à haute température elles sont

quasiment inexistantes. Ces constatations laissent entendre que les propriétés mécaniques de l'oxyde et plus généralement le niveau de contraintes induit dans l'oxyde affecte la cinétique d'oxydation.

Ceci a été confirmé par de nombreuses études expérimentales : Marcus et Sheng [30] sont les premiers à avoir montré que la croissance d'oxyde est retardée sur des substrats de formes convexes ou concaves. Les travaux de Yamabe et Imai [31] à propos de la cinétique d'oxydation aux angles convexes et concaves de tranchées profondes, ont montré que l'amincissement d'oxyde à ces angles était plus important lorsque l'oxydation se déroulait à basse température plutôt qu'à haute température, en ambiance sèche plutôt qu'humide et en ambiance pure plutôt que diluée. Or toutes ces conditions conduisent à un niveau de contraintes plus élevé dans l'oxyde.

Sheng et Marcus [32] ont également observé un phénomène d'amincissement d'oxyde, lors de la formation de l'oxyde de grille d'un transistor MOSFET. Cet amincissement se produit au niveau de la zone de transition de l'oxyde de champ et résulte de la nature non-plane de l'oxydation.

Mizuno [33] fut le premier à observer un amincissement des oxydes de champ pour des structures LOCOS possédant une ouverture du masque de nitrure faible (<1micron). Ce phénomène a récemment été étudié par Lutze pour les structures PBL [34].

Pour l'ensemble de ces études expérimentales, les auteurs ont conclu que les contraintes mécaniques générées dans l'oxyde sont à l'origine de la réduction de l'oxydation.

C'est à KAO [35 et 36] que l'on doit la première étude quantitative. Elle consiste en l'oxydation de structures de silicium de formes convexes et concaves réalisées par gravure sèche. Cette procédure expérimentale lui a permis de montrer que la réduction de la cinétique d'oxydation était plus prononcée sur une forme concave que convexe. La figure 5 montre les échantillons qui ont servi à l'expérience et en figure 6 apparaît un résultat typique où la différence entre structures convexes et concaves est bien apparente.

Ces expériences ont permis de déterminer quantitativement le rôle des contraintes mécaniques dans la cinétique d'oxydation. Jusque là, on ignorait si les contraintes agissaient sur le mécanisme de transport des agents oxydants ou sur la réaction chimique à l'interface. Certains modèles considéraient uniquement une réduction du coefficient linéaire B/A [37] ou du coefficient parabolique B [38], d'autres impliquaient une diminution de la diffusivité [39]. Kao a conclu qu'à la fois le coefficient de réaction à la surface et la diffusivité des espèces oxydantes étaient réduits par les contraintes

mécaniques. L'apport significatif de cette modélisation est qu'elle a permis l'extension en deux dimensions du modèle de Deal et Grove et l'élargissement de son domaine de validité.

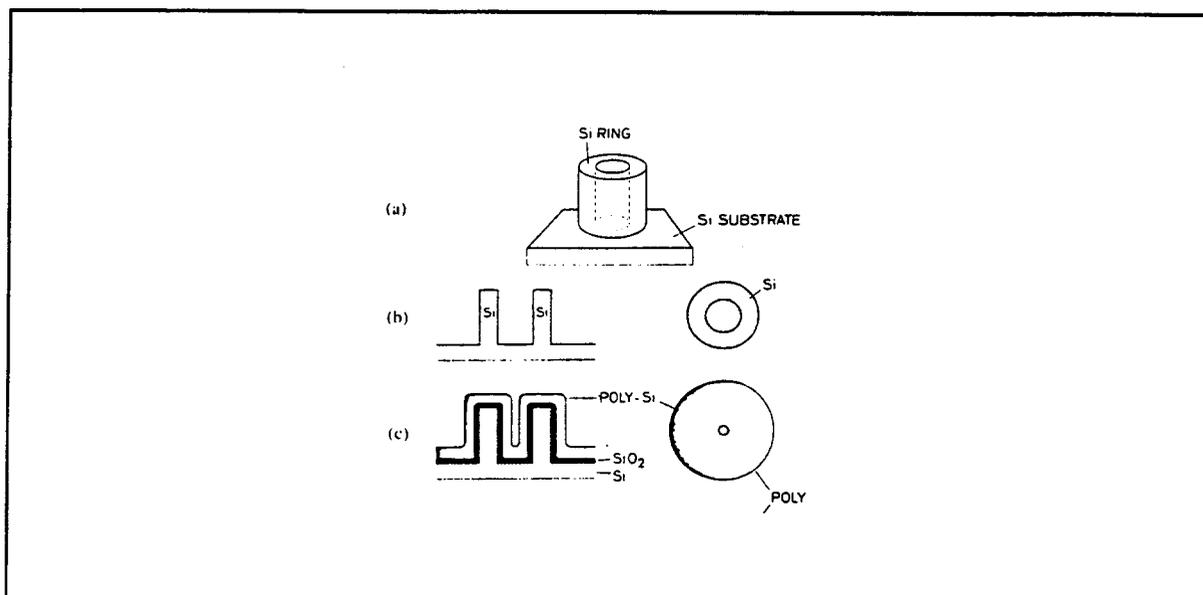


Figure 5 : Méthodes expérimentales de Kao : a) cylindre de silicium gravé anisotropiquement, b) coupe et vue de dessus de la structure et c) après oxydation [35].

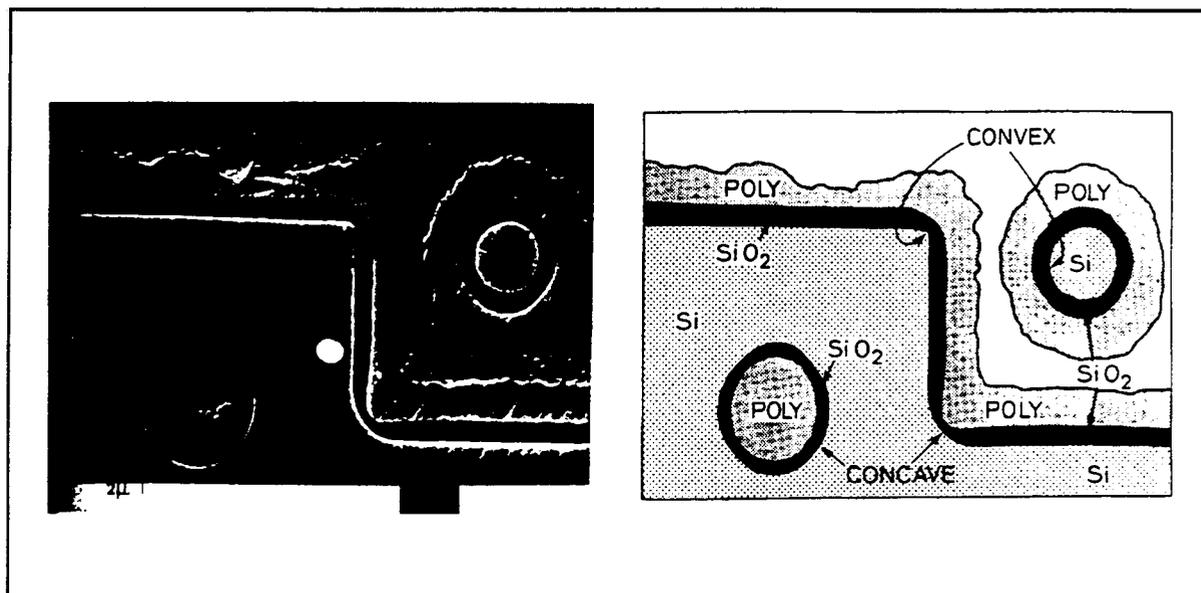


Figure 6 : Comparaison entre des surfaces convexes et concaves d'après Kao : a) relevé SEM, b) schéma [35]. Noter la réduction d'oxydation qui est différente entre les angles convexes et concaves.

1.4 Les autres modélisations unidimensionnelles

Il faut savoir que d'autres approches que celle de Deal et Grove ont été formulées afin d'expliquer l'ensemble des connaissances expérimentales actuelles sur l'oxydation du silicium. Il existe des modèles structurels [40] qui minimisent les contraintes mécaniques et donc l'énergie nécessaire à la réaction. Des modèles plus chimiques [41 et 42] indiquent que c'est uniquement la réaction à l'interface qui régit la cinétique. D'autres [43] sont basés sur la théorie classique de l'oxydation des métaux [44]. Enfin certains avancent que la loi de Deal et Grove donnant une dépendance linéaire-parabolique de l'épaisseur d'oxyde T_{ox} en fonction du temps n'est qu'une approximation d'une loi plus générale où T_{ox} est fonction d'une puissance du temps [45 et 46]. Mais étant donné leur complexité, ces modèles sont restés peu populaires dans le domaine de la simulation de technologies silicium.

1.5 Conclusion

Le modèle de Deal et Grove suppose implicitement que le flux des agents oxydants reste normal à l'interface (théorie unidimensionnelle) et que les contraintes mécaniques n'ont aucune action sur la cinétique d'oxydation. Or, dans le cas des structures d'isolation latérales, ces conditions ne sont pas vérifiées au niveau du bec d'oiseau. Il est alors nécessaire d'utiliser une formulation multidimensionnelle non-linéaire. Les solutions bidimensionnelles du problème sont nombreuses mais restent en majorité basées sur une extension 2D du modèle de Deal et Grove. Leurs différences résident dans les méthodes numériques utilisées comme le montre la section suivante. Quelques solutions en trois dimensions ont été proposées mais étant donné la difficulté de l'implantation numérique et l'importance des ressources informatiques qu'elles requièrent, les modèles sont restés peu sophistiqués jusqu'à présent.

2. MODELES MULTIDIMENSIONNELS

La connaissance physique du mécanisme d'oxydation a permis de développer différents modèles multidimensionnels suivant que l'on privilégie : 1) la rapidité de calcul ou 2) leur capacité de prédiction. Les modèles analytiques 2D (§ 2.1) répon-

dent à la première exigence mais restent limités à des structures peu évoluées telles le LOCOS. Pour pouvoir simuler des procédés plus complexes, il est nécessaire de tenir compte explicitement de l'état de contraintes dans l'oxyde. Une solution mixte (§ 2.2) basée sur la définition analytique du profil des contraintes en fonction des paramètres géométriques de la structure permet d'obtenir un excellent compromis. La modélisation la plus générale reste purement numérique (§ 2.3), mais elle nécessite des ressources informatiques considérables. De plus, son implantation algorithmique est très complexe, comme en témoigne la rareté des solutions 3D (§ 2.4).

2.1 Modèles analytiques 2D

Dans le cas de structures d'isolation conventionnelles (LOCOS ou LOCOS enterré), la forme d'oxyde peut être correctement décrite par une loi analytique. La variation de l'épaisseur d'oxyde en fonction de la coordonnée latérale et du temps d'oxydation peut être approximée par [47] :

$$T_{\text{ox}}(x, t) = T_{\text{pad}} + 0.5 (T_{\text{ox1D}}(t) - T_{\text{pad}}) \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{\sqrt{2}}{\varphi} \left(\frac{x + d_1}{T_{\text{ox1D}}(t)} \right) \right) \right] \quad (9)$$

où T_{pad} est l'épaisseur du piédestal d'oxyde, $T_{\text{ox1D}}(t)$ est l'épaisseur 1D de l'oxyde de champ calculée par la loi de Deal et Grove, φ et d_1 sont respectivement le facteur de forme et l'origine de la fonction "erf" par rapport à l'extrémité du masque de nitrure (figure 7). Ces deux derniers paramètres sont déterminés en fonction des caractéristiques technologiques de l'oxydation [48].

Parmi les modèles analytiques les plus évolués, citons celui proposé par Guillemot [49 et 50] qui permet de simuler avec exactitude deux catégories de LOCOS: 1) les structures à nitrures épais, 2) les structures à nitrures minces.

Cependant, ce type de modèle ne permet pas de prédire les formes d'oxyde parce qu'il dépend de paramètres géométriques extraits d'expériences. C'est pourquoi nous avons proposé une solution mixte (ou pseudo-analytique) permettant cette prédiction. Le modèle est basé sur une description analytique du profil de contraintes à l'interface Si/SiO₂, qui est fonction de la déflexion du masque de nitrure, de son épaisseur et de la température d'oxydation. Le profil analytique des contraintes a été calibré à partir de simulations purement numériques. La modélisation numérique qui a servi de référence est décrite en détail au chapitre III sous l'appellation de "modèle incomplet".

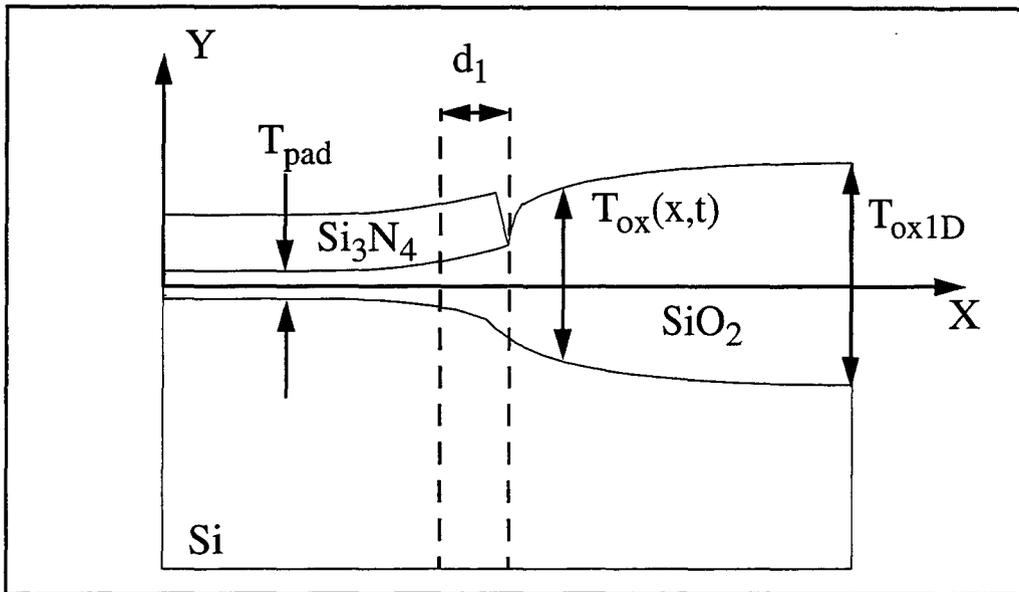


Figure 7 : Définition des paramètres d'une structure LOCOS pour le modèle analytique 2D décrit dans [47].

La modélisation pseudo-analytique permet une simulation rapide des structures LOCOS, donnant un bon accord avec l'expérience, mais pour une gamme de procédés plus étendue que le modèle analytique pur.

2.2 Modèle pseudo-analytique [51]

2.2.1 Algorithme

L'algorithme de notre solution pseudo-analytique est donné à la figure 8. Pour chaque pas de temps, on résout numériquement l'équation de diffusion des agents oxydants à travers l'oxyde. A partir de la concentration en agents oxydants dans le domaine d'oxyde, les déplacements des noeuds situés à l'interface Si/SiO₂ sont déterminés à partir la relation :

$$\vec{V}_{ox} = -\frac{k_{si}C(x,y)}{N_1} \hat{n}(x,y) \quad (10)$$

où N_1 est le nombre d'atomes nécessaires à la formation d'un volume unitaire d'oxyde, $\vec{n}(x, y)$ est le vecteur unitaire normal à la surface, k_{Si} est la constante de réaction et $C(x, y)$ est la concentration en agents oxydants.

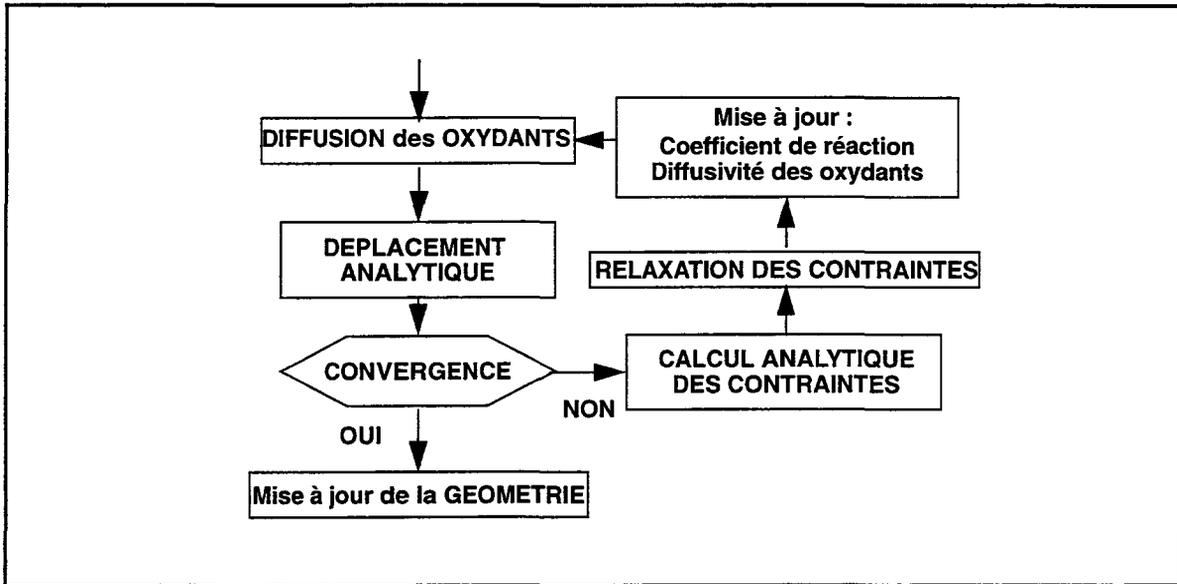


Figure 8 : Algorithme du modèle pseudo-analytique.

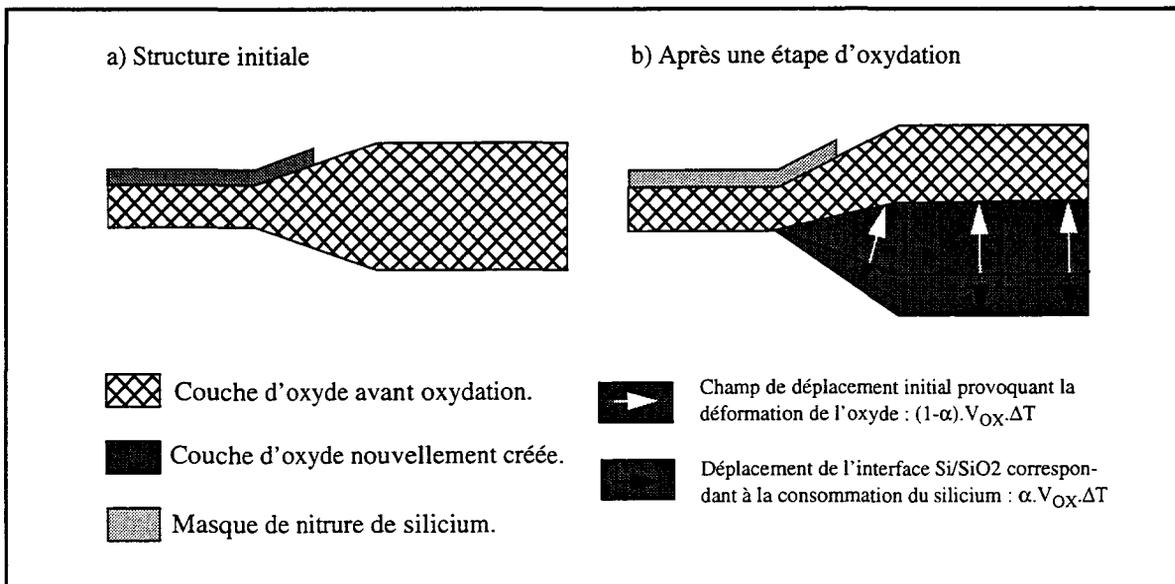


Figure 9 : Illustration du déplacement de l'oxyde lors d'une étape d'oxydation : a) oxyde initial, b) structure après l'étape élémentaire d'oxydation.

Comme le montre la figure 9, l'oxyde initial est déformé avec le champ de déformation $(1-\alpha).V_{ox}.\Delta T$, tandis que l'interface se déplace dans la direction opposée de la quantité $\alpha.V_{ox}.\Delta T$, où la quantité α est le rapport volumétrique de la réaction d'oxydation.

Comme la nouvelle position de l'interface Si/SiO₂ est déterminée par la symétrie du champ de déplacement $(1-\alpha).V_{ox}.\Delta T$, seule la position de la nouvelle surface (SiO₂/air) de l'oxyde doit être calculée analytiquement.

Ce modèle analytique de déplacement est illustré en figure 10.

Pour les noeuds M situés à l'interface SiO₂/Si₃N₄, le module du déplacement est pris égal à celui du noeud M', noeud appartenant à l'interface Si/SiO₂ le plus proche de M. La direction de ce déplacement est prise perpendiculaire à l'interface SiO₂/Si₃N₄ au point M (condition de non-glissement du nitrure sur l'oxyde).

Pour les noeuds N situés à l'interface SiO₂/gaz, le déplacement est pris symétrique (module et direction par rapport à l'axe des ordonnées) à celui du point N', point appartenant à l'interface Si/SiO₂ situé à la même abscisse que N.

Pour les noeuds O situés sur les côtés de l'oxyde, leurs déplacements sont pris verticaux, avec un module égal à celui de leurs noeuds symétriques respectifs O'.

Les déplacements des noeuds de l'interface Si₃N₄/gaz sont pris verticaux et égaux à ceux des points appartenant à l'interface SiO₂/Si₃N₄ ayant la même abscisse.

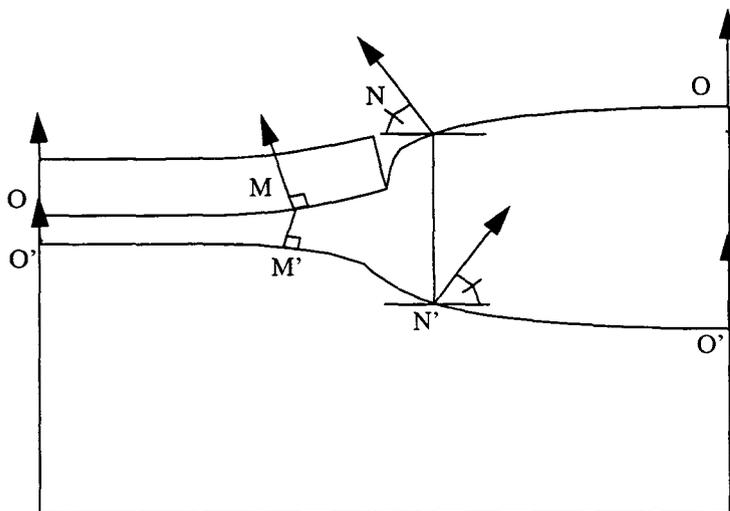


Figure 10 : Illustration du déplacement analytique de l'oxyde.

Le champ de contraintes est calculé analytiquement en fonction de la nouvelle déflexion du nitrure et de l'épaisseur d'oxyde 1D. Les détails concernant ce calcul analytique sont donnés dans le paragraphe suivant. Une technique de sous-relaxation numérique est ensuite appliquée au champ de contraintes afin d'aboutir à une solution auto-cohérente. La stratégie employée est identique au modèle numérique (paragraphe 3.2 du chapitre III). La diffusivité des agents oxydants et le coefficient de réaction qui dépendent du champ de contraintes, sont alors mis à jour en fonction de la nouvelle distribution des contraintes. La procédure est répétée jusqu'à ce que l'on obtienne la convergence sur l'ensemble des déplacements des noeuds. La structure est finalement mise à jour et l'oxyde remaillé.

REMARQUE : 1) La convergence est très aisée, typiquement cinq itérations sont nécessaires à son obtention.

2) La majeure partie du temps C.P.U. est consommée par la re-génération de la structure (maillage de l'oxyde), le temps de calcul pour les boucles de relaxation des contraintes étant réellement négligeable. A titre indicatif, pour une simulation complète d'une structure type LOCOS conventionnel, un facteur 60 est gagné entre la solution numérique et la solution pseudo-analytique.

2.2.2 Formulation analytique du champ de contraintes induit par le nitrure

Il est bien connu que la forme de l'oxyde de champ dépend de l'épaisseur du masque de nitrure. Plus le nitrure est épais, moins il est flexible, induisant un champ de contraintes important dans l'oxyde et à l'interface Si/SiO₂. Ces contraintes entraînent une réduction de la cinétique d'oxydation près du bord de nitrure via les équations suivantes :

$$D_{\text{ox}}^{\sigma} = D_{\text{ox}} \exp\left(-\frac{PV_D}{KT}\right) \text{ pour } P > 0 \quad (11)$$

$$k_{\text{si}}^{\sigma} = k_{\text{si}} \exp\left(\frac{\sigma_{\text{nn}} V_K}{KT}\right) \text{ pour } \sigma_{\text{nn}} < 0 \quad (12)$$

où D_{ox} et k_{si} sont respectivement la diffusivité des agents oxydants et le coefficient de réaction à l'interface, à bas niveau de contraintes, P est la pression hydrostatique dans l'oxyde, σ_{nn} est la contrainte normale à l'interface oxydée, K est la

constante de Boltzmann, T est la température. V_D et V_K sont respectivement les volumes d'activation de l'effet des contraintes sur la diffusivité et le coefficient de réaction à l'interface.

A titre d'illustration, la figure 11 montre deux structures LOCOS pour des topologies extrêmes du masque de nitrure [50]. Le détail du procédé de fabrication est exposé au paragraphe 2.2.3 (Exemples 1 et 2).

Il nous faut donc, dans un premier temps, quantifier cet effet. En étudiant les structures de la figure 11, les seuls paramètres qui entraînent de fortes différences de forme de l'oxyde sont l'épaisseur du nitrure et la déflexion maximale de celui-ci, les températures étant identiques et les durées comparables. Le but est de définir analytiquement les champs de contraintes en fonction de la topologie du nitrure : épaisseur et déflexion. Pour ce faire, nous avons utilisé le modèle numérique afin de relever l'évolution temporelle des contraintes durant une simulation de structure LOCOS. La simulation numérique qui sert de référence est celle de la structure LOCOS donnée à la figure 11 pour une épaisseur du masque de nitrure égale à 190 nm. Les niveaux des contraintes à l'interface Si/SiO₂ ont été relevés après 6, 41, 82, 188, 253 et 310 minutes d'oxydation. Les figures 12 a) et b) superposent respectivement les profils a) de contraintes normales et b) de pression, le long de l'interface Si/SiO₂.

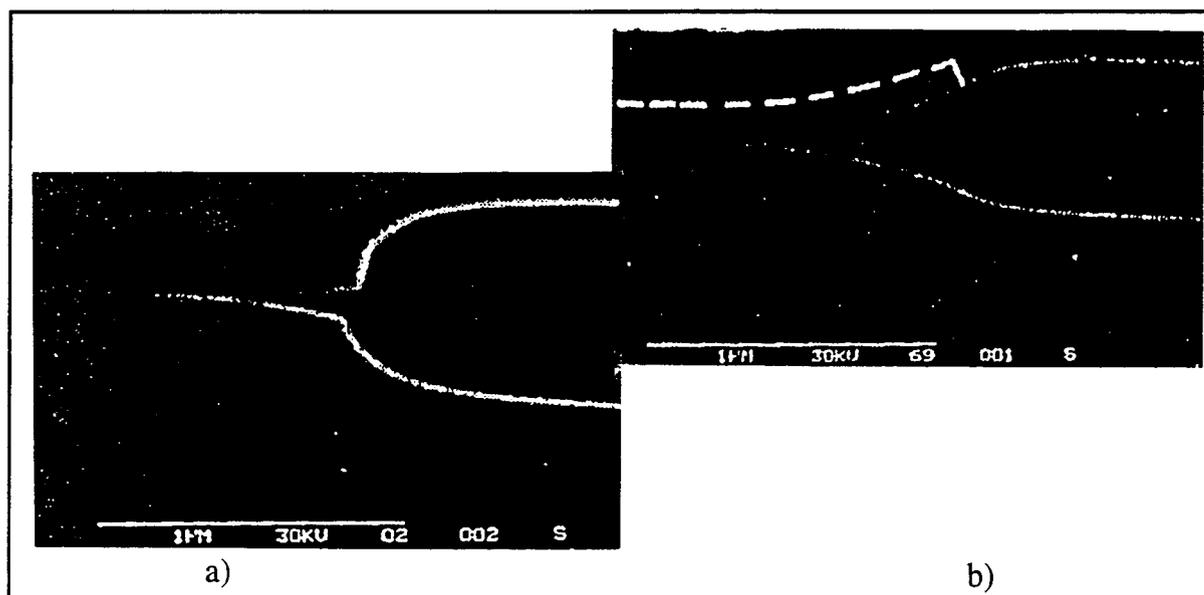


Figure 11 : Photographies SEM de deux structures LOCOS fabriqués à 920°C : a) l'épaisseur du nitrure est 190 nm , b) l'épaisseur du nitrure est 100 nm [50].

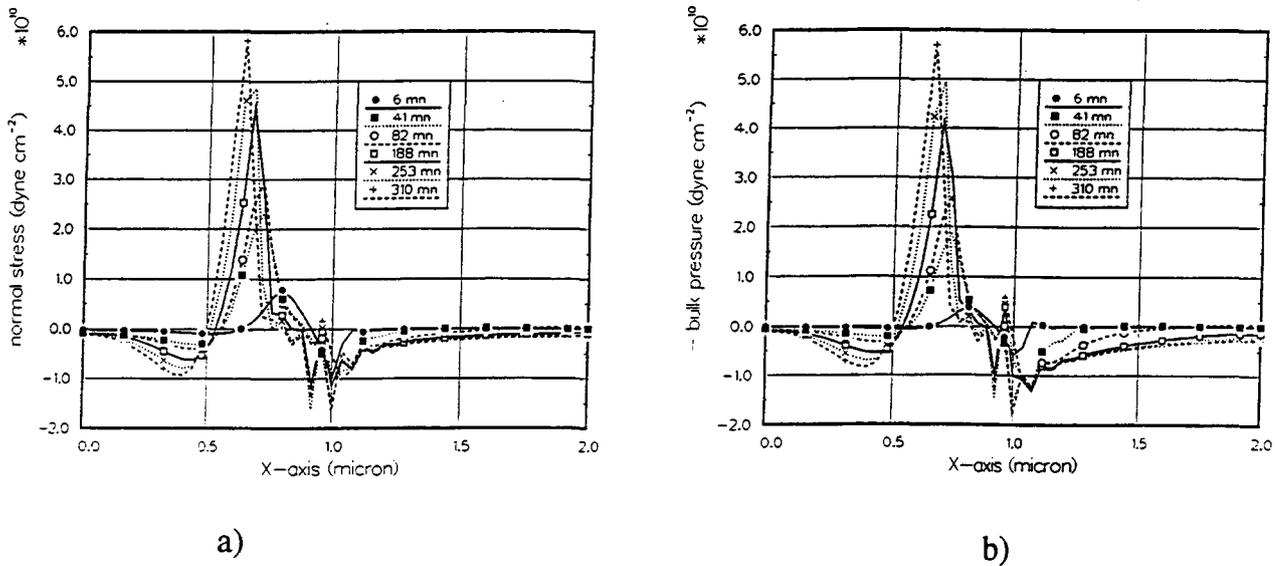


Figure 12 : Evolution des profils a) de contraintes normales b) de pression, le long de l'interface Si/SiO₂ durant la simulation numérique de la structure LOCOS.

Ces deux figures démontrent qu'il existe une grande similitude entre les profils de contraintes normales $\sigma_{nn}(x)$ et de pressions $P(x)$ le long de l'interface Si/SiO₂. De ce fait, nous avons considéré l'approximation suivante :

$$\sigma_{nn}(x) = -P(x) \quad (13)$$

L'étude de la figure 12 montre qu'en se déplaçant vers les x croissants, le profil des contraintes normales possède une succession de trois zones :

□ une première zone de compression ($0 < x < 0.5 \mu\text{m}$) sous le nitrure. Cette première zone est sans influence sur l'oxydation dans la mesure où les concentrations en oxydants, et donc la vitesse d'oxydation y sont très faibles. Cette zone de compression est ignorée dans le modèle analytique.

□ une zone de tension qui est induite par la déflexion maximale du nitrure. Le pic de tension augmente avec la déflexion et l'extension de cette zone de tension reste quasiment constante.

□ une zone de compression près du bord du nitrure. L'extension de cette zone sous le nitrure reste à peu près constante (comprise entre 100 et 300 nm) et la contrainte est maximale à l'aplomb du bord du nitrure. Cette compression diminue lorsque l'on se déplace vers les x croissants.

De ces observations, le profil de contrainte normale peut être schématisé par la courbe de la figure 13 :

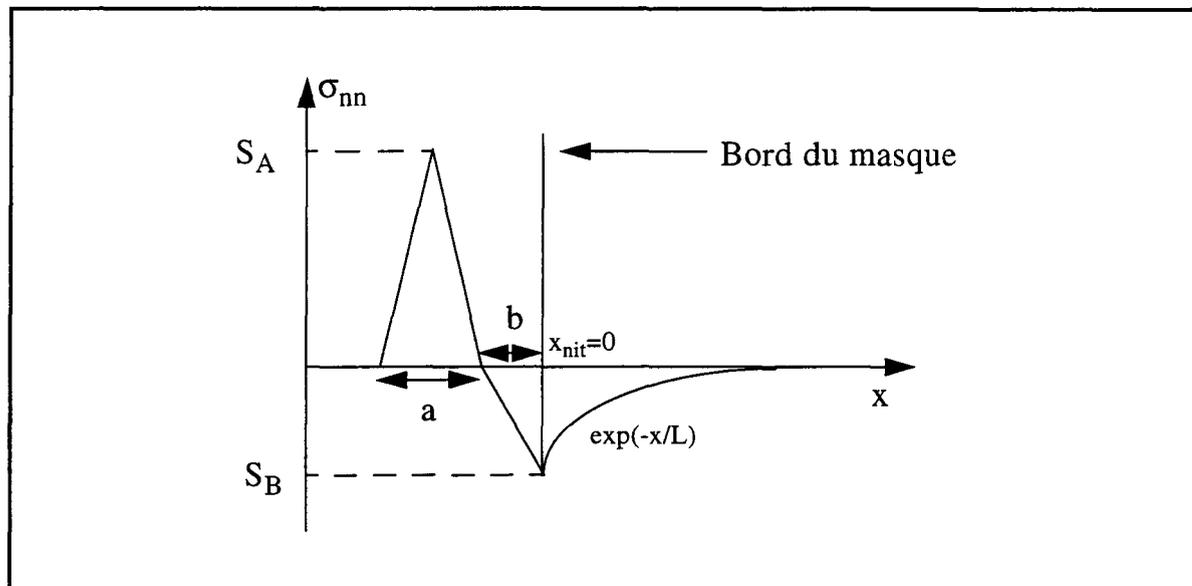


Figure 13 : Profil analytique du champ de contrainte normale à l'interface Si/SiO₂

Le profil analytique du champ de contraintes normale à l'interface, référencé en x par la position latérale du bord du nitrure, est paramétré par cinq constantes :

S_A : pic tensile sous le nitrure.

a : extension de la zone tensile sous le nitrure.

S_B : pic de compression localisé à l'aplomb du bord de nitrure.

b : extension de la zone de compression sous le nitrure.

L : longueur caractéristique de la décroissance de la compression au delà du nitrure.

Ces paramètres sont fonction de la température, de l'épaisseur de l'oxyde de champ et de la déflexion du nitrure. Leur calibration est détaillée en annexe à la fin de ce chapitre.

2.2.3 Exemples d'application

Afin d'illustrer la validité de cette modélisation, cinq structures LOCOS ont été simulées, correspondant à des conditions expérimentales très variées.

- Exemple 1 : Structure de référence du modèle - LOCOS1
 - dépôt d'un pad d'oxyde de 10 nm,
 - dépôt de la couche de nitrure 190 nm,
 - gravure du nitrure,
 - oxydation humide durant 310 minutes à 920°C,
 - épaisseur d'oxyde finale : 630 nm.

Le résultat de la simulation est donné en figure 14, à comparer avec la photographie SEM donnée à la figure 11.

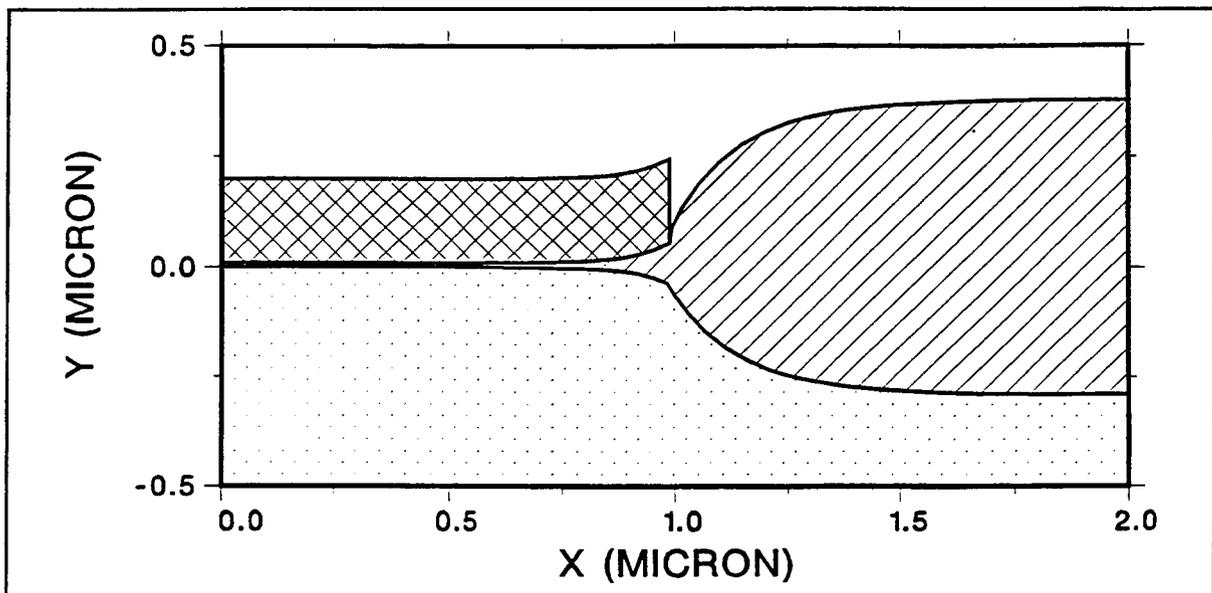


Figure 14 : Simulation par défaut de la structure LOCOS1 avec le modèle pseudo-analytique.

- Exemple 2 : LOCOS2
 - dépôt d'un pad d'oxyde de 40 nm,
 - dépôt de la couche de nitrure 100 nm,
 - gravure du nitrure,
 - oxydation humide durant 220 minutes à 920°C.

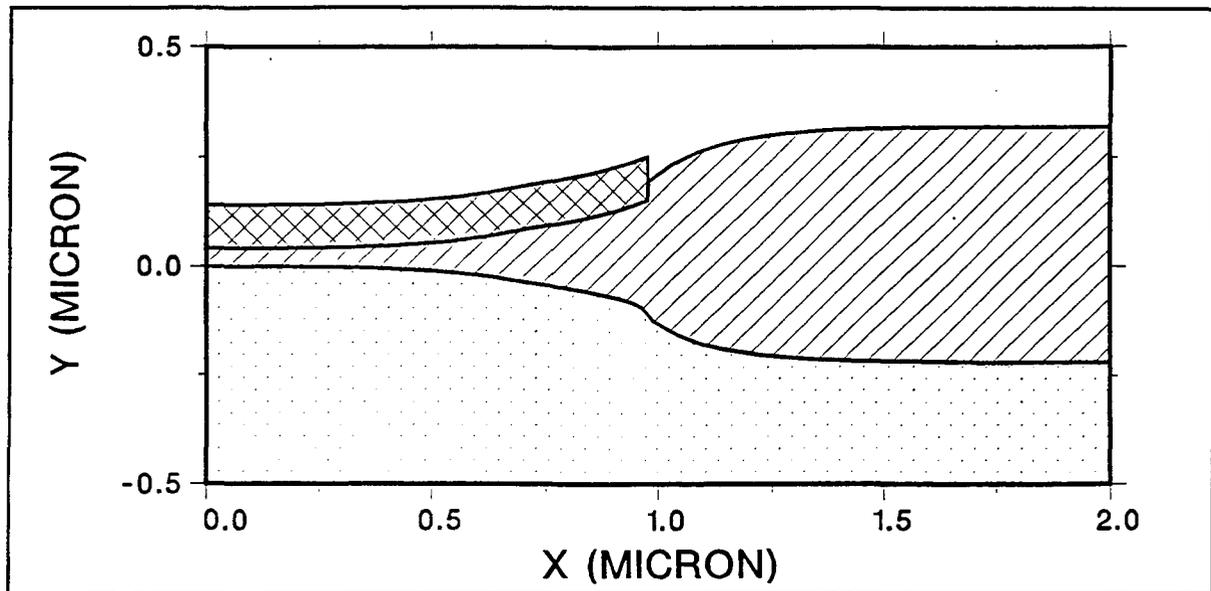


Figure 15 : Simulation par défaut de la structure LOCOS2 avec le modèle pseudo-analytique.

Le résultat de la simulation est donné en figure 15. Un bon accord existe entre cette simulation et le résultat expérimental (figure 11). Ceci confirme la validité de l'expression du champ de contraintes pour une épaisseur différente du nitruire, sans aucun autre ajustement des paramètres. L'effet de pincement induit par la nitruire est légèrement surestimé. Ceci est lié au fait que ce modèle pseudo-analytique ne fait pas intervenir la plasticité du nitruire comme cela est développé au chapitre III pour la solution numérique.

□ Exemple 3 :

- dépôt d'un pad d'oxyde de 50nm,
- dépôt de la couche de nitruire 180, 120 et 40 nm,
- gravure du nitruire,
- oxydation humide de 170 mn à 1000°C.

Les figures 16, 17 et 18 comparent les résultats de simulation pseudo-analytique et les relevés expérimentaux. Pour ces trois structures et sans autre coefficient d'ajustement, un accord remarquable est obtenu.

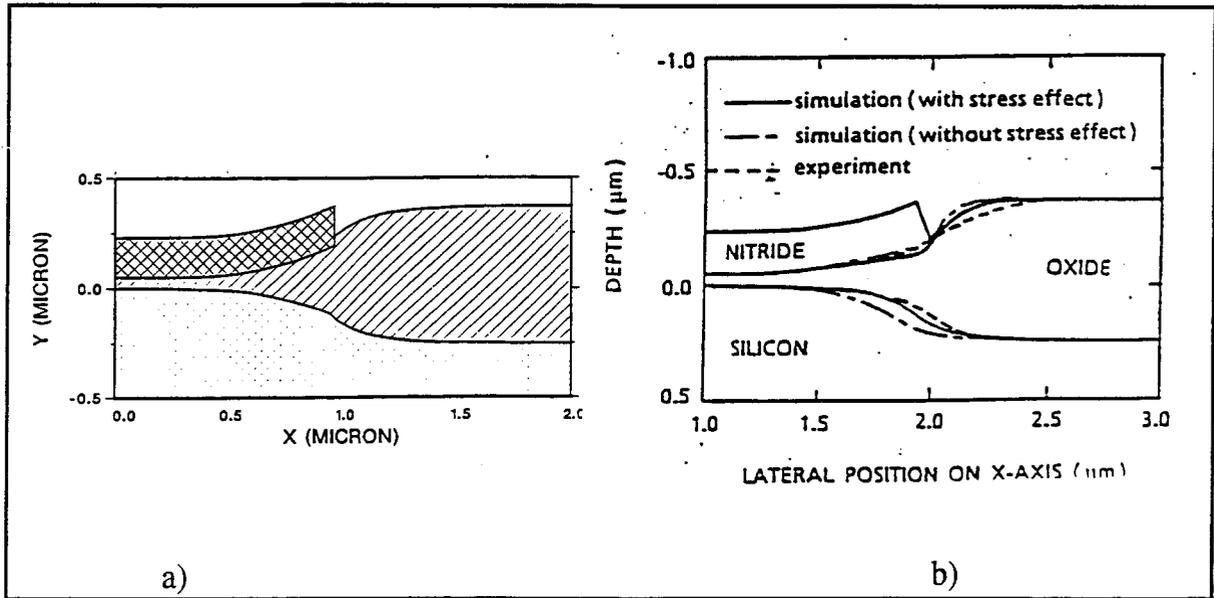


Figure 16 : Confrontation de l'approche semi-analytique avec le procédé étudié par Uimimoto[52]. L'épaisseur du nitrure est 180 nm. (a) Simulation pseudo-analytique. (b) Résultats de simulations par les modèles numériques de Uimimoto, avec et sans effet de contraintes et relevé expérimental.

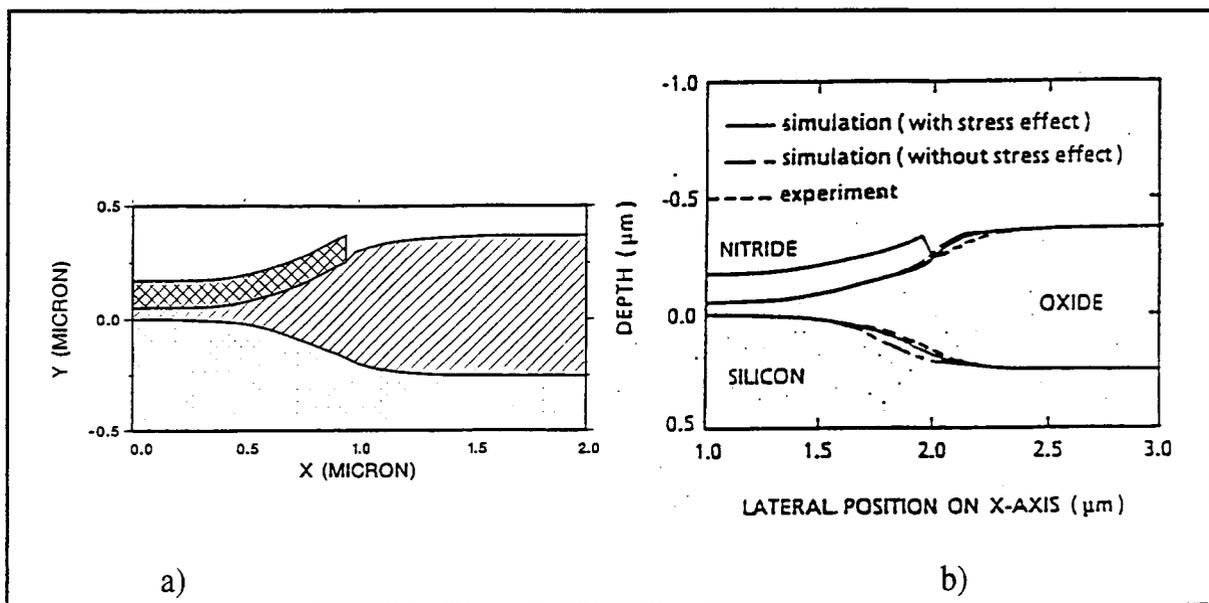


Figure 17 : Confrontation de l'approche semi-analytique avec le procédé étudié par Uimimoto[52]. L'épaisseur du nitrure est 120 nm. (a) Simulation pseudo-analytique. (b) Résultats de simulations par les modèles numériques de Uimimoto, avec et sans effet de contraintes et relevé expérimental.

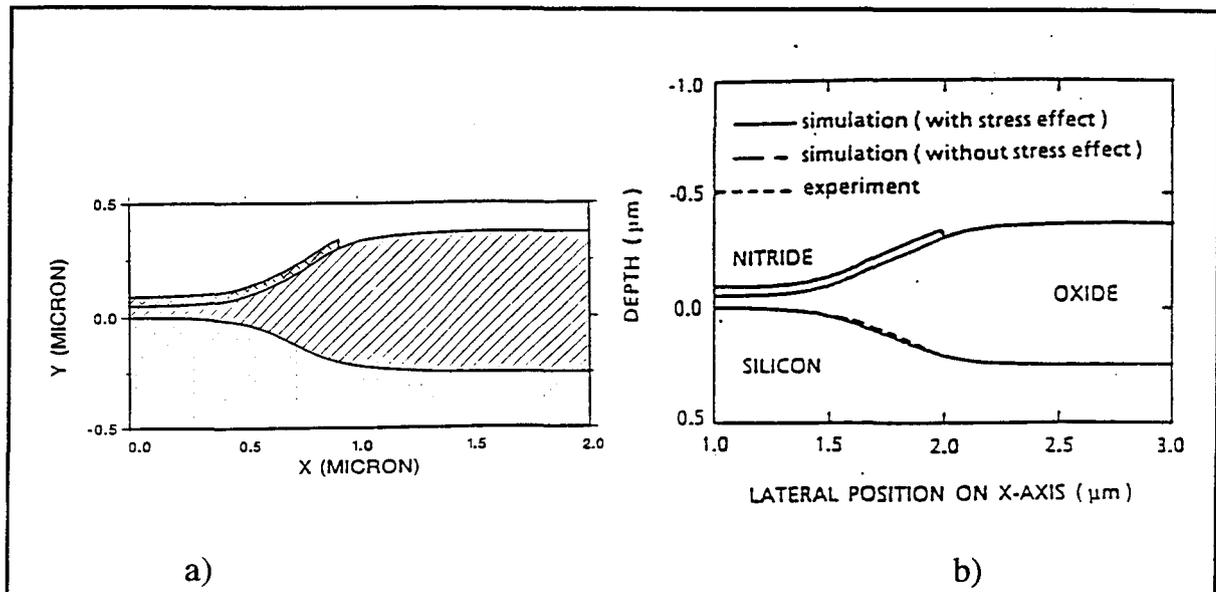


Figure 18 : Confrontation de l'approche semi-analytique avec le procédé étudié par Umimoto[52]. L'épaisseur du nitrure est 40 nm. (a) Simulation pseudo-analytique. (b) Résultats de simulations par les modèles numériques de Umimoto, avec et sans effet de contraintes et relevé expérimental.

L'ensemble de ces simulations valident les algorithmes du modèle et démontrent que cette approche est une excellente alternative pour la simulation de structure LOCOS. L'approche analytique du champ de contraintes et des déplacements de l'oxyde a été développée pour des structures LOCOS. Si d'autres structures veulent être simulées (SILO, SWAMI, poly-Buffer LOCOS,...), un modèle spécifique doit être développé pour chacune d'entre elles, toujours en se basant sur des résultats purement numériques et des relevés expérimentaux.

2.3 Modèles Numériques 2D

Le développement et l'optimisation de structures d'isolation avancées telles les SILO, PBL, et SWAMI nécessite des solutions numériques évoluées, coûteuses en temps CPU, mais beaucoup plus précises. Basées sur l'extension bidimensionnelle du modèle de Deal et Grove, elles possèdent une structure algorithmique commune que l'on peut résumer de la manière suivante (figure 19) :

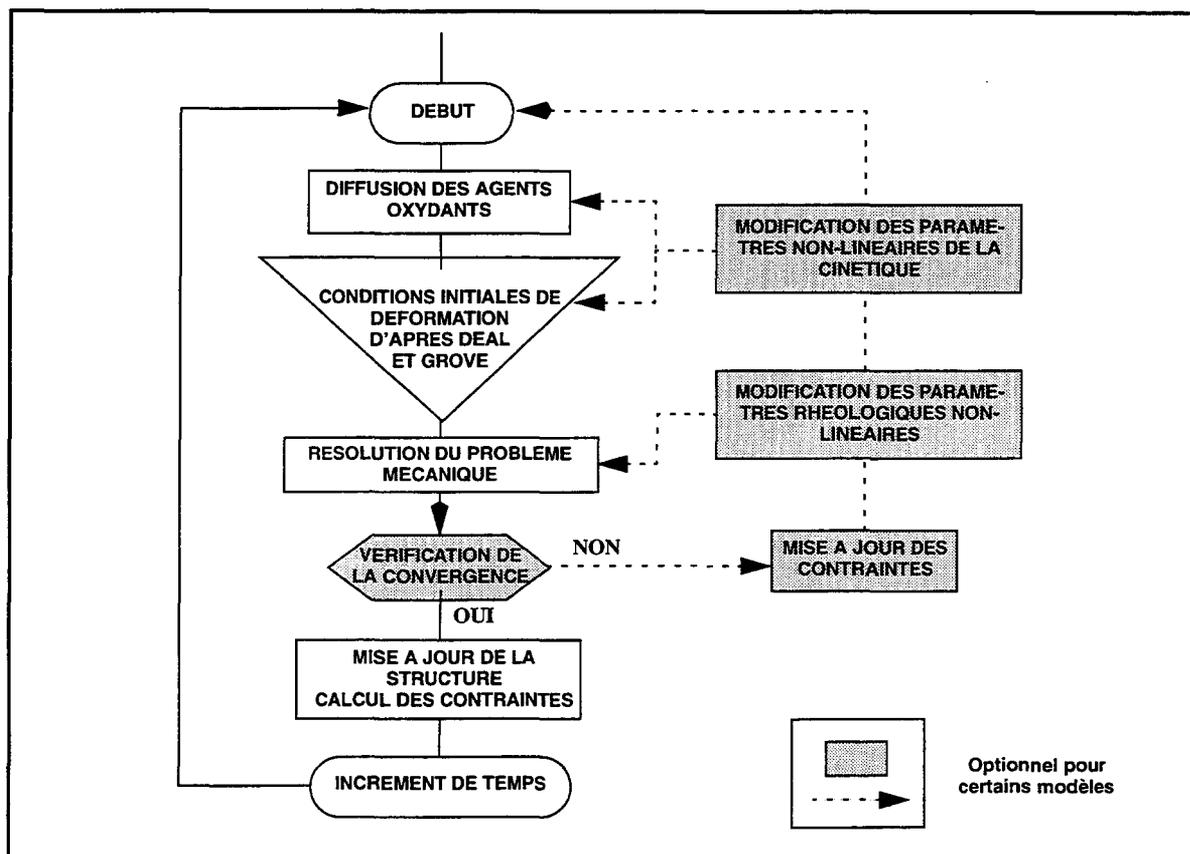


Figure 19 : Structure des algorithmes de modélisation numérique de l’oxydation thermique du silicium.

- 1) Résolution de l’équation de diffusion des agents oxydants à travers l’oxyde.
- 2) Calcul de la vitesse d’oxydation le long de l’interface en fonction de la loi de croissance de Deal et Grove et détermination de l’état de déformation initiale.
- 3) Déformation de la structure vers un état d’équilibre en fonction des propriétés mécaniques des matériaux.
- 4) Si les effets non-linéaires sont pris en compte, procédure itérative et vérification de la convergence.
- 5) Mise à jour de la topologie de la structure et calcul des contraintes en fin de pas de temps.
- 6) Répétition de la procédure pour le pas de temps suivant.

Pour chacune de ces 6 étapes, plusieurs options sont possibles. La validité de ces choix sera discutée au chapitre suivant où est exposé le modèle numérique.

Une des toutes premières modélisations dans ce domaine est rapportée par Chin [53] : il considère une équation linéaire de diffusion des agents oxydants, dans un état quasi-statique. La vitesse d'oxydation calculée d'après Deal et Grove fournit le déplacement initial de l'interface Si/SiO₂. L'oxyde se déforme comme un liquide visqueux incompressible, d'après l'équation de Navier-Stokes. Les effets non-linéaires sont ignorés.

Needs a proposé une solution où le problème de diffusion et l'état de déformation initial de la structure sont traités de manière similaire aux travaux de Chin. Par contre, la déformation de l'oxyde est considérée comme élastique d'après les Equations de Navier-Lamé [54].

L'amélioration de ces modélisations a nécessité d'inclure les principes suivants :

1) Prise en compte de l'effet des contraintes sur le mécanisme de transport des agents oxydants, sur la réaction à l'interface et sur la viscosité des matériaux [36 et 55].

2) Modélisation des propriétés mécaniques des autres matériaux Si₃N₄, Si, Si-Poly,... [56].

3) Généralisation des comportements rhéologiques pour une large gamme de procédés technologiques : introduction de la viscoélasticité [57].

Une synthèse de l'ensemble de ces modèles permet de conclure qu'il existe différentes solutions regroupant l'une ou l'autre de ces qualités mais relativement peu les intègrent toutes. La difficulté provient de l'implantation algorithmique particulièrement complexe et consommatrice en temps CPU. Enfin pour les solutions complètes qui existent [65, 57], le manque de calibration par rapport à des procédés technologiques variés est un inconvénient important.

Les méthodes numériques employées peuvent être classées en trois groupes :

1) L'approche "différence finie" utilisant une méthode de transformation des coordonnées [58, 59, 60 et 61]. Le domaine physique, de géométrie complexe, est transformé en un domaine "numérique" simple, invariant au cours du temps. Cette

méthode permet de conserver la qualité du maillage et évite la régénération de celui-ci suite à l'évolution temporelle de la géométrie des structures. Cependant, elle reste généralement limitée à des topologies simples telles le LOCOS.

2) La méthode des équations intégrales ou éléments frontières (Boundary Element Method) [62, 63, 64] consiste à résoudre le problème sur la frontière des domaines qui correspondent à chaque matériau et non sur l'ensemble du domaine. Ceci facilite les procédures de mise à jour des structures mais son application est limitée aux problèmes linéaires.

3) L'approche la plus répandue est celle des éléments finis [Finite Element Method] qui permet de traiter des géométries très complexes mais nécessite une régénération du maillage à chaque pas de calcul, très coûteuse en temps CPU.

Nous rapportons dans ce manuscrit une modélisation numérique complète, calibrée pour une large gamme de conditions expérimentales mettant en jeu des solutions numériques originales basées sur la méthode des éléments finis, permettant d'obtenir des résultats de simulation avec des temps CPU tout à fait raisonnables.

2.4 Modèles Numériques 3D

La diminution des dimensions des dispositifs à des valeurs submicroniques (CMOS 0.25 μm et 0.18 μm) donne des fonctionnements électriques fortement liés à leur structure tri-dimensionnelle [66 et 67]. Il est donc nécessaire de recourir à des simulateurs de technologies et de dispositifs en trois dimensions. Si les outils 3D de simulation de dispositifs semble arriver à maturité [68], il n'en est pas de même des simulateurs de technologies. Quelques réalisations sont rapportées dans la littérature, qui cependant sont très restreintes dans leur champ d'application :

soit elles correspondent à une translation dans un espace 3D de simulations purement bidimensionnelles [69].

soit elles n'incluent pas l'ensemble des étapes de fabrication d'un procédé se limitant souvent au mécanisme de diffusion [70].

soit encore elles se basent sur une modélisation physique peu avancée, qui ne permet pas d'avoir des résultats quantitatifs prédictifs [71], ni d'étudier des structures très

complexes.

L'absence de programmes purement 3D est lié à la complexité des problèmes qu'ils doivent résoudre :

- ❑ le développement d'algorithmes capables de gérer l'évolution de la topologie de la structure et la définition des surfaces des différents volumes.
- ❑ la mise au point d'algorithmes efficaces minimisant le temps CPU.

Le projet européen PROMPT [72] vise à développer un environnement informatique permettant d'effectuer la simulation complète du procédé de technologie d'un circuit intégré, utilisant des programmes 1D, 2D déjà mis au point (COMPOSITE, DIOS, IMPACT, STORM, SUPREM IV, TITAN) et des modules purement 3D développés au sein du projet. Parmi ces nouveaux modules 3D, le traitement de l'oxydation du silicium est un des points cruciaux. Il sera basé sur la stratégie numérique employée dans notre modèle numérique 2D.

3. ANNEXE

L'extraction des paramètres du modèle analytique se fait directement à partir des résultats numériques donnant la variation de l'épaisseur d'oxyde 1D, de la déflexion du nitrure et de la contrainte normale à l'interface, en fonction du temps. Les expressions sont ici déduites pour une épaisseur de nitrure de 190 nm et pour une température d'oxydation de 920°C.

- ❑ Contrainte tensile maximale : S_A

S_A est fonction de la déflexion maximale du bord de nitrure d_n et de son épaisseur T_n . De plus, afin de pouvoir utiliser notre modèle dans une gamme de procédés technologiquement intéressants, il est nécessaire de modéliser l'influence de la température. C'est pourquoi le coefficient K_T a été introduit qui permet de modéliser la

variation des contraintes maximales S_A et S_B avec la température. Comme le montre la figure 20 un bon accord est obtenu avec l'expression suivante :

$$S_A(\text{dyne/cm}^2) = 730 (T_n)^3 \cdot K_T \cdot d_n^{0.7} \quad (14)$$

où d_n et T_n sont la déflexion maximale et l'épaisseur du nitrure, respectivement, exprimées en nanomètre.

REMARQUE : $K_T = 1$ à 900°C , $K_T = 0.147$ à 1000°C (valeur ajustée).

□ Extension de la zone tensile : a

L'extension de la zone tensile varie peu durant la simulation. Nous la prendrons constante :

$$a = 300 \text{ nm} \quad (15)$$

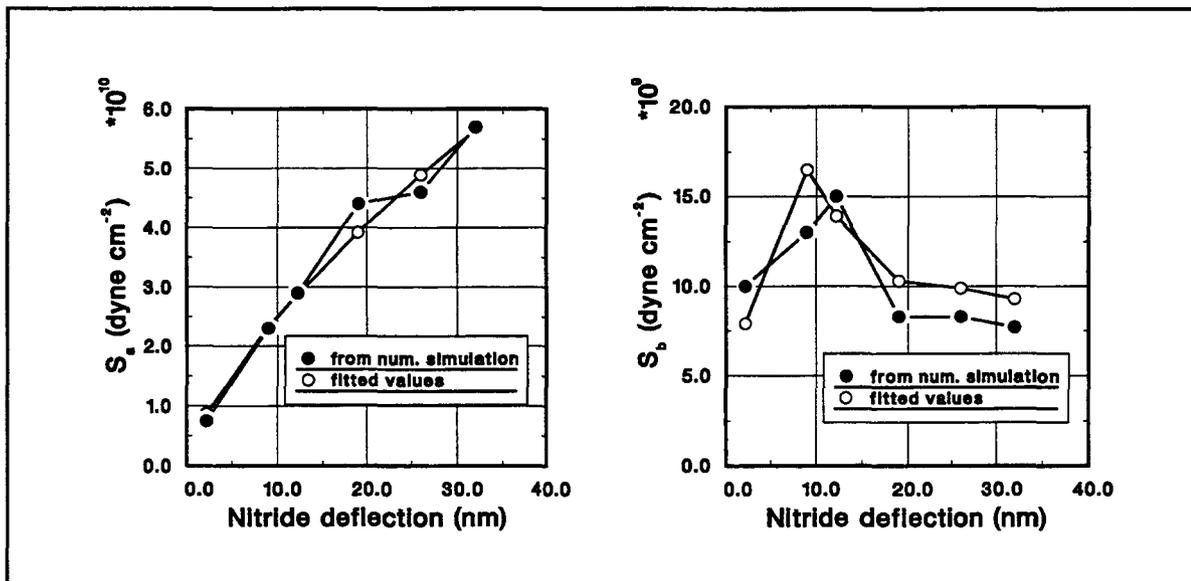


Figure 20 : Extraction des contraintes tensile et compressive maximales. Comparaison entre les relations (14 et 16) et les valeurs extraites de la simulation numérique.

□ Contrainte de compression maximale : S_B

Liée au modèle visco-élastique, la contrainte de compression maximale augmente en début de simulation et tend à se stabiliser puis à décroître. Deux effets sont en compétition, le premier est l'augmentation de la déflexion du nitrure qui augmente S_B , le second est l'augmentation de l'épaisseur d'oxyde sous le nitrure qui tend à relaxer le pic de compression. La formule (16) peut être extraite qui donne un accord raisonnable comme le montre la figure 21.

$$S_B \left(\text{dyne } \text{\AA} \text{ cm}^2 \right) = S_A \exp \left(-T_{\text{ox}} \text{\AA} 350 \right) \quad (16)$$

où T_{ox} est l'épaisseur 1D de l'oxyde, exprimé en nanomètre.

□ Extension de la zone compressive sous le nitrure : b

L'extension de la zone de compression sous le nitrure est également fonction de la déflexion maximale, l'expression suivante est proposée :

$$b \text{ (nm)} = 72.5 d_n^{0.3} \quad (17)$$

Le résultat de cette extraction est donné en figure 21.

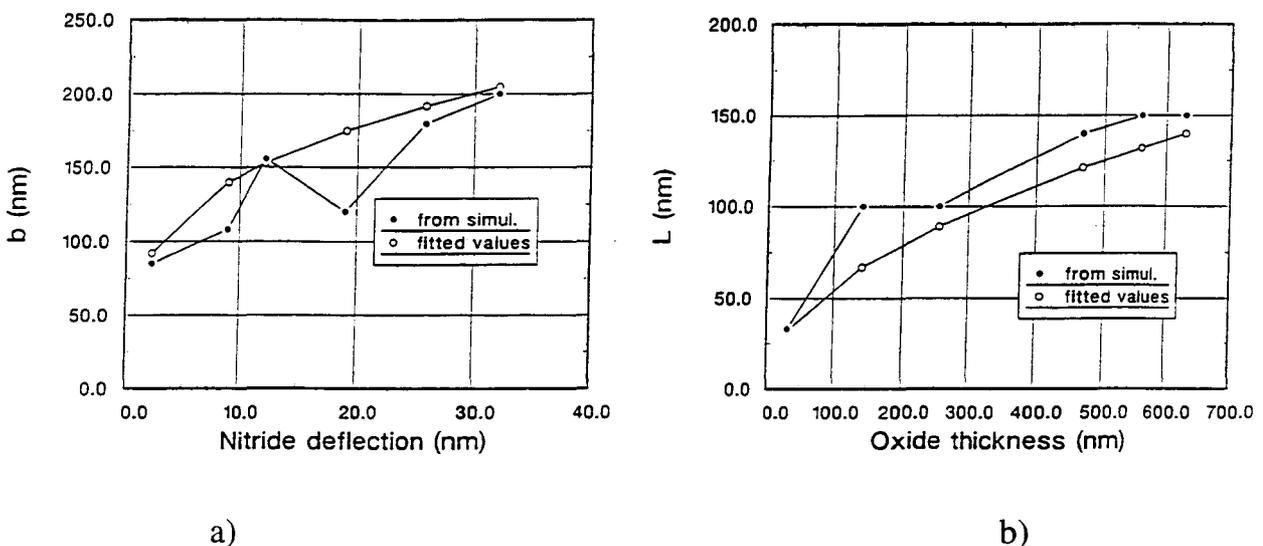


Figure 21 : Extraction de a) l'extension de la zone de compression sous le nitrure et de b) la longueur caractéristique de décroissance de la compression. Comparaison entre les relations (17 et 18) et les valeurs extraites de la simulation numérique.

□ Longueur caractéristique de la décroissance de la compression : L

La longueur caractéristique de la décroissance de la compression est fonction de l'épaisseur 1D d'oxyde T_{OX} . Plus l'oxyde est épais, plus l'espace possible pour la relaxation des contraintes est important. Une expression possible de la longueur L est la suivante :

$$L(\text{nm}) = 5.6 T_{OX} \quad (18)$$

La confrontation de la relation (18) avec la simulation numérique est illustrée en figure 21.

En terme algorithmique, la procédure permettant le calcul des contraintes normales et des pressions est la suivante :

□ Calcul de l'abscisse du bord de nitrure x_{nit} et de la déflexion maximale du nitrure, d_n .

□ Calcul des paramètres régissant la détermination analytique des contraintes normales (S_A , S_B , a, b, L).

□ Calcul des contraintes normales pour les noeuds interface selon le modèle analytique de la figure 13.

□ Calcul de la pression pour tous les éléments de l'oxyde. Cette pression est unidimensionnelle ne dépendant que de l'abscisse, x_g , du centre de gravité du triangle :

$$\forall y_g : P(x_g, y_g) = -\sigma_{nn}(x_g) \quad (19)$$

Pour estimer les valeurs initiales des contraintes (étape 0 dans l'organigramme), x_{nit} et d_n sont calculés en fonction de la géométrie présente en début de pas de temps. Dans la boucle de relaxation des contraintes, x_{nit} et d_n sont calculés en fonction de la géométrie présente en début de pas de temps sur laquelle le déplacement incrémental analytique est imposé.

REMARQUE : 1) La présence des contraintes est uniquement prise en compte dans l'étape de diffusion des agents oxydants. En effet, la constante de réaction et la diffusivité des agents oxydants dépendent respectivement des contraintes normales et des pressions selon les relations (11) et (12) du chapitre III.

2) Le comportement plastique équation (31) du chapitre III n'est pas directement inclus dans le déplacement analytique de l'oxyde, mais il est explicitement pris en compte dans la mesure où les champs de contraintes et de pressions ont été extraits de simulations numériques modélisant cet effet.

3) Comme dans le modèle numérique, les contraintes normales sont gérées par noeuds et les pressions par éléments.

Chapitre 2

Références bibliographiques

- [1] P. J. Jorgensen, *Journal of Chemical Physics*, vol. 37, p.874, 1962.
- [2] C. J. Han and C. R. Helms, "Silicon Dry Oxidation Kinetics : Effects of the Choice of Integration Constant on Fits to the Linear Parabolic Model", *Journal of the Electrochemical Society : Solid State Science and Technology*, vol. 134, no. 2, p. 504, February 1987.
- [3] B. E. Deal and A. S. Grove, "General Relationship for the Thermal Oxidation of Silicon", *Journal of Applied Physics*, vol. 36, no. 12, p. 3770, December 1965.
- [4] "Properties of Silicon", INSPEC, p. 477, London 1988.
- [5] S. Rigo, F. Rochet, B. Agius, and A. Straboni, *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 129, p. 867, 1982.
- [6] J. D. Cawley, J. W. Halloran and A. R. Cooper, *Oxid. Met.*, vol. 28, p. 1, 1987.
- [7] M. Susa et K. Nagata, "Thermal Oxidation of Silicon Substrates Through Oxygen Diffusion", *Materials Science and Engineering*, p. 51, 1991.
- [8] R. J. Kriegler, Y. C. Cheng and D. R. Colton, *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 119, p. 388, 1972.
- [9] K. Hirabayashi and I. Iwamura, *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 120, p. 1595, 1973.

- [10] M. Hirose and T. Tanaka, *Oyo Buturi*, vol. 56, p. 70, 1987.
- [11] A. G. Revesz and R. J. Evans, *Journal of Phys. Chem. Solids*, vol. 30, p. 551, 1969.
- [12] C. P. Ho and J. D. Plummer, "Si/SiO₂ Interface Oxidation Kinetics : a Physical Model for the Influence of High Substrate Doping Levels : I. Theory", *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 126, p. 1516, 1979.
- [13] E. A. Irene, H. Massoud and E. Tierney, "Silicon Orientation Effects on Thermal Oxidation", *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 133, no. 6, p. 1253, 1986.
- [14] E. A. Irene, "Silicon Oxidation Studies : Some Aspects of the Initial Oxidation Regime", *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 125, p. 1708, 1978.
- [15] M. M. Hecht, F. J. Grunthanner, P. Pianetta, L. I. Johansson and I. Lindau, *Journal of Vacuum Sciences and Technology A*, vol. 2, p. 584, 1984.
- [16] E. A. Taft, "Diffusion of Oxygen in Silicon Thermal Oxides", *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 132, p. 2486, 1985.
- [17] E. A. Irene et al., "A Measurement of the Effect of Intrinsic Film Stress on the Overall-Rate of Thermal Oxidation of Silicon", *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 132, p. 2815, 1985.
- [18] L. M. Landsberger et al., "Indicators of Stress Relaxation in Two-Step Thermally Grown Silicon Dioxide Films on Silicon", *ECS Symposium*, vol. 87, p. 333, 1986.
- [19] E. P. Eernisse, "Stress in Thermal SiO₂ during Growth", *Applied Physics Letters*, vol. 35, 1979.
- [20] E. Kobeda et al., "A Measurement of Intrinsic SiO₂ Films Stress Resulting from Low Temperature Thermal Oxidation of Silicon", *Journal of Vacuum Sciences and Technology B*, vol. 4, p. 729, 1986.
- [21] E. A. Irene, E. Tierney and J. Angilello, "A Viscous Flow Model to Explain the Appearance of High Density SiO₂ at Low Oxidation Temperatures", *Journal of the Electrochemical Society*, vol. 129, p. 2594, 1982.
- [22] G. Ghibaudo, "Modelling of Silicon Oxidation Based on Stress Relaxation", *Philosophical Magazine B*, vol. 55, No 2, p 147, February 1987.
- [23] A. Poncet, "Accurate Simulation of Mechanical Stresses in Silicon During Thermal Oxidation", *Proceedings of SISDEP'93*, vol. 5, p. 173, September 1993.
- [24] J. K. Srivastava and J. B. Wagner, *Proceedings of the Electrochemical Society Meeting, Cincinnati, Ohio, 7-11 May 1984*.

- [25] V. K. Samalam, Applied Physics Letters, vol. 47, p. 736, 1985.
- [26] M. Orlowski and V. Pless, "Analysis of Rapid Dry Oxidation of Silicon", Applied Physics A, vol. 46, p. 67, 1988.
- [27] R. R. Razouk, L. N. Lie and B. E. Deal, Journal of the Electrochemical Society, vol. 128, p. 2214, 1981.
- [28] H. Z. Massoud, J. D. Plummer and E.A. Irene, "Thermal Oxidation of Silicon in dry Oxygen : Accurate Determination of the Kinetic Rate Constants", Journal of the Electrochemical Society, vol. 132, no. 7, p. 1745, 1985.
- [29] G. Hetherington et al., "The Viscosity of Vitreous Silica", Physics and Chemistry of Glasses, vol. 5, p. 130, 1964.
- [30] R. Marcus and T. T. Sheng, "The Oxidation of Shaped Silicon Surfaces", Journal of the Electrochemical Society, vol. 129, p. 1278, 1982.
- [31] K. Yamabe and K. Imai, "Nonplanar Oxidation and Reduction of Oxide Leakage Currents at Silicon Corners by Rounding-Off Oxidation", IEEE Trans. Electron Devices, vol. 34, p. 1681, 1987.
- [32] T. T. Sheng and R. B. Marcus, "Gate Oxide Thinning at the Isolation Oxide Wall", Journal of the Electrochemical Society, vol. 125, p. 432, 1978.
- [33] T. Mizuno, S. Sawada, S. Maeda and S. Shinozaki, "Oxidation Rate Reduction in the Submicrometer LOCOS Process", IEEE Trans. Electron Devices, vol. 34, no. 11, p. 2255, 1987.
- [34] J. W. Lutze, A. H. Perera and J. P. Krusius, "Field Oxide Thinning in Poly Buffer LOCOS Isolation with Active Area Spacings to 0.1 μ m", Journal of the Electrochemical Society, vol. 137, p. 1867, 1990.
- [35] D. B. Kao, J. P. McVittie, W. D. Nix and K. C. Saraswat, "Two-Dimensional Thermal Oxidation of Silicon-1. Experiments", IEEE Trans. Electron Devices, vol. 34, no. 5, p. 1008, 1987.
- [36] D. B. Kao, J. P. McVittie, W. D. Nix and K. C. Saraswat, "Two-Dimensional Thermal Oxidation of Silicon-2. Modeling stress effects in wet oxides", IEEE Trans. Electron Devices, vol. 35, no. 1, p. 25, 1988.
- [37] E. A. Irene, Journal of Applied Physics, vol. 54, p. 5416, 1983.
- [38] A. Fargeix, G. Ghibaudo and E. A. Irene, Journal of Applied Physics, vol. 54, p. 7153, 1983.
- [39] R. H. Doremus, Thin Solid Films, vol. 122, p. 191, 1984.

- [40] W. A. Tiller, Journal of the Electrochemical Society, vol. 128, p. 689, 1981.
- [41] R. Ghez and Y. J. Van der Meulen, Journal of the Electrochemical Society, vol. 119, p. 1100, 1972.
- [42] J. Blanc, Applied Physics Letters, vol. 33, p. 424, 1978.
- [43] D. R. Wolters and A. T. A. Zegers-Van Duynhoven, "Kinetics of Dry Oxidation. I. Space-Charge-Limited Growth", Journal of Applied Physics, vol. 65, no. 12, p. 5126, June 1989.
- [44] S. I. Raider and A. Berman, Journal of the Electrochemical Society, vol. 125, p. 629, 1978.
- [45] E. A. Irene, "New Results on Low-Temperature Thermal Oxidation of Silicon", Philosophical Magazine B, vol.55, p. 131, February 1987.
- [46] A. Reisman, E. H. Nicollian, C. K. Williams and C. J. Merz, J. Electron. Mater, vol. 1, p. 45, 1987.
- [47] B. R. Penumalli, "Lateral Oxidation and Redistribution of Dopant", 2nd International Conference on Numerical Analysis of Semiconductor Device and I. C. s, Dublin, 17-19 June 1981.
- [48] E. Bassous, H.N. Yu and V. Maniscalco, "Topology of Silicon Structures with Recessed SiO₂", Journal of the Electrochemical Society, vol. 123, p. 1729, 1976.
- [49] TSUPREM-4 User guide, Version 5.2, p. 20, September 1992.
- [50] N. Guillemot, "A New Analytical Model of the Bird's Beak ", IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-34, no. 5, p. 1033, May 1987.
- [51] D. Collard, B. Baccus and V. Senez, "Pseudo-analytical Modelling of Stress Dependent Silicon Oxidation", Proceedings of the ESSDERC'92, p. 491, Leuven, 1992.
- [52] H. Umimoto, S. Odanaka, I. Nakao and H. Esaki, "Numerical Modeling of Nonplanar Oxidation Coupled with Stress Effects", IEEE Transactions on Computer-Aided Design, vol. 8, no. 6, p. 599, June 1989.
- [53] D. Chin, S. H. Oh and R. W. Dutton, " A General Solution Method for Two-Dimensional Nonplanar Oxidation", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. ED-30, no. 9, p. 993, September 1983.
- [54] M. J. Needs, V. Jovic, C. Taylor, K. Board and M.J. Cooke,"A 2-D Linear Elastic Model for the Local Oxidation of Silicon using the Boundary Element Method", Proceedings of the SISDEP'86, Swansea, 1986.

- [55] P. Sutardja and W. G. Oldham, "Modelling of Stress Effects in Silicon Oxidation", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 36, no. 11, p. 2415, November 1989.
- [56] S. Isomae et al., "A new Two-Dimensional Silicon Oxidation Model", IEEE Transactions on Computer Aided Design, vol. 6, p. 410, 1987.
- [57] A. Poncet, "Finite-Element Simulation of Local Oxidation of Silicon", IEEE Transactions on Computer-Aided Design, vol. CAD-4, no. 1, p. 41, January 1985.
- [58] R. B. Penumalli, "A Comprehensive Two-Dimensional VLSI Process Simulator Program, BICEPS", IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED 30, p. 986, September 1983.
- [59] K. Wimmer, R. Bauer, S. Halama, G. Hobler and S. Selberherr, "Transformation Methods for Nonplanar Process Simulation", Proceedings of SISDEP'91, vol. 4, p. 131, 1991.
- [60] J. Lorenz, J. Pelka, H. Ryssel, A. Sachs, A. Seidl and M. Svoboda, "COMPOSITE-A Complete Modeling Program for Silicon Technology", IEEE Transactions on Computer-Aided Design, vol. CAD-4, 1985.
- [61] N. Saito, H. Miura, S. Sakata, M. Ikegawa and H. Masuda, "A Two-Dimensional Thermal Oxidation Simulator Using Visco-Elastic Stress Analysis", Proceedings of the IEDM89, p. 695, Washington DC, December 1989.
- [62] C. A. Brebbia, "The Boundary Element Method for Engineers", Pentech Press, London, 1978.
- [63] H. Matsumoto and M. Fukuma, "Numerical Modeling of Nonuniform Si Thermal Oxidation", IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-32, p. 132, 1985.
- [64] T. L. Tung, J. Connor and D. A. Antoniadis, "A Boundary Element Method for Modeling Viscoelastic Flow in Thermal Oxidation", IEEE Transactions on Computer-Aided Design, vol. 7, no. 2, p. 215, February 1988.
- [65] J. P. Peng, D. Chidambarao and G. R. Srinivasan, "Novel : a Non-Linear Viscoelastic Model for Thermal Oxidation of Silicon", COMPEL, vol. 10, p. 341, December 1991.
- [66] M. Thurner and S. Selberherr, "Three-Dimensional Effects due to the Field Oxide in MOS Devices analyzed with MINIMOS 5", IEEE Transactions on Computer-Aided Design, vol. CAD-9, no. 8, p. 856, 1990.
- [67] T. D. Linton, P. A. Blakey and D. P. Neikirk, "The Impact of Three-Dimensional Effects on EEPROM Cell Performance", IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-39, no. 4, p. 843, 1992.
- [68] G. Baccarani, P. Ciampolini and A. Pieratoni, " Three-Dimensional Simulation of Semiconductor Devices : State of the Art and Prospects", Nucl. Inst. Meth, vol. A326, p. 253, 1993.

[69] S. Ushio, K. Nishi, S. Kuroda, K. Kai and J. Ueda, "A Fast Three-Dimensional Process Simulator OPUS/3D With Access to Two-Dimensional Simulation Results", IEEE Transactions on Computer-Aided Design, vol. 9, no. 7, p. 41, July 1990.

[70] T. K. Okada, S. Kambayashi, S. Onga, I. Mizushima, K. Yamabe and J. Matsunaga, "Non Equilibrium Diffusion Process Modeling Based on Three-Dimensional Simulator and a Regulated Point-Defect Injection Experiment", Proceedings of the IEDM90, p. 733, 1990.

[71] S. Odanaka, H. Unimoto, M. Wakabayashi, H. Esaki, "SMART-P : Rigorous Three-Dimensional Process Simulator on a Supercomputer", IEEE Transactions on Computer-Aided Design, vol. CAD-7, no. 6, p. 675, 1988.

[72] Process Optimization in Multiple Dimensions for Semiconductor Technology (PROMPT), Projet JESSI BT8B/ESPRIT 8150.

Chapitre 3

L'approche IMPACT-4

Ce chapitre présente la solution numérique originale de l'oxydation du silicium implantée dans le simulateur de technologies IMPACT-4. Cette modélisation inclut un calcul mécanique avancé pour l'ensemble des matériaux. Deux approches sont détaillées : l'une traite exactement l'expansion de volume du nouvel oxyde et les déformations qu'elle entraîne sur tous les matériaux, l'autre considère uniquement les déformations de la silice et du nitrure. Le chapitre se conclut par une comparaison de ces deux solutions.

La modélisation bidimensionnelle de l'oxydation implantée dans IMPACT-4 est basée sur l'extension du modèle de Deal et Grove à un espace 2D. Deux schémas algorithmiques ont été développés. Une explication détaillée de leurs différences est fournie au paragraphe 1. Le mécanisme d'oxydation 2D et la stratégie numérique mise en oeuvre sont présentés aux paragraphes 2 et 3, respectivement. Finalement, plusieurs applications sont présentées qui démontrent la robustesse de l'implantation numérique et valident la modélisation physique. Enfin, l'équivalence des deux approches est prouvée au travers de la simulation d'une structure LOCOS.

1. SCHEMAS ALGORITHMIQUES

Deux schémas algorithmiques sont proposés, respectivement appelés complet et incomplet, qui diffèrent essentiellement par :

1) Le mode initial de sollicitation de la structure suite à l'augmentation de volume, conséquence de la croissance d'un nouvel oxyde.

2) La modélisation comportementale des matériaux oxydés (silicium, polysilicium).

Le modèle complet qui constitue la solution la plus générale au problème de l'oxydation traite avec exactitude :

□ L'expansion de volume créée par la transformation de la couche de silicium ou de polysilicium en oxyde.

□ L'action de cette expansion sur le matériau oxydé et les couches supérieures. Elle est calculée de manière globale afin d'obtenir une bonne précision sur le champ de contraintes qui en résulte.

□ La manière dont les différents matériaux s'opposent à la sollicitation que constitue cette expansion de volume. La modélisation doit posséder un champ d'application le plus vaste possible et être finement calibrée.

Il correspond au niveau de modélisation nécessaire à une prédiction exacte du champ de contraintes généré dans une structure d'isolation après oxydation.

Cependant, si le but de la simulation se limite à prédire les formes d'oxyde, ce qui nécessite seulement de connaître la distribution des contraintes mécaniques dans la silice, alors on peut considérer que les matériaux oxydés sont des corps euclidiens ou infiniment rigides. En effet, comme les modules d'Young du silicium et du polysilicium sont deux fois supérieurs à celui de la silice, il est raisonnable de les considérer comme infiniment rigides. Cette approximation est à la base du modèle incomplet. Il en résulte que :

□ L'expansion de volume générée par le nouvel oxyde se traduit par une condition initiale de déplacement de l'interface Si/SiO₂.

□ Les effets de cette expansion sur la géométrie et le niveau de contraintes ne sont calculés que pour les matériaux oxyde et nitrure.

L'avantage du modèle incomplet est qu'il permet de simuler des structures d'isolation avec des temps CPU réduits, tout en prédisant des formes d'oxyde identiques au modèle complet (confère paragraphe 4).

Cependant, quelque soit le modèle, une question subsiste à propos de la nature de l'expansion de volume créée par la formation du nouvel oxyde. En effet, lors de la réaction d'oxydation, la conversion d'une mole de silicium, occupant un volume de 12cm^3 , en une mole de SiO_2 , possédant un volume de 27cm^3 , peut se réaliser isotropiquement ou de façon unidimensionnelle, dans la direction normale à l'interface Si/ SiO_2 .

Si l'accroissement de volume s'effectue isotropiquement, la réduction des degrés de liberté imposée par le substrat génère des contraintes mécaniques latérales en compression dans la silice (figure 1b). Cet état de contrainte "intrinsèque" permet d'expliquer le régime initial de l'oxydation sèche dans certains modèles unidimensionnels [1]. A haute température, ces contraintes sont immédiatement relaxées par un écoulement visqueux, ce qui n'est pas le cas à basse température. Une estimation simple de la valeur de cette contrainte tangentielle, supposant une rigidité parfaite du substrat est donnée par [2] :

$$\sigma = \frac{\left(1 - \sqrt[3]{2.25}\right)E}{1 - \nu} \quad (1)$$

où E est le module d'Young de l'oxyde et ν son coefficient de Poisson.

Cette estimation correspond à une contrainte de compression environ égale à -25 GPa. Or de tels niveaux de contraintes n'ont jamais été mesurés, ce qui veut dire que même à basse température, une relaxation visqueuse se produit très rapidement. Or, ceci est impossible étant donnée la valeur élevée de la viscosité de la silice à ces températures. D'autres modèles [3], supposant une déformation instantanée du substrat dès que l'augmentation de volume s'est produite, arrivent à des estimations plus réalistes qui correspondent à une valeur de - 0.45 GPa.

L'existence d'une contrainte intrinsèque pourrait être renforcée par des études expérimentales qui montrent que l'oxydation d'un substrat plat provoque une déflexion de celui-ci [4, 5 et 6]. Cependant, comme les mesures de déflexion ont été réalisées à température ambiante, une incertitude demeure sur l'origine de l'état de com

pression de l'oxyde, qui pourrait uniquement être attribué à la différence des coefficients de dilatation thermique des deux matériaux silicium et oxyde.

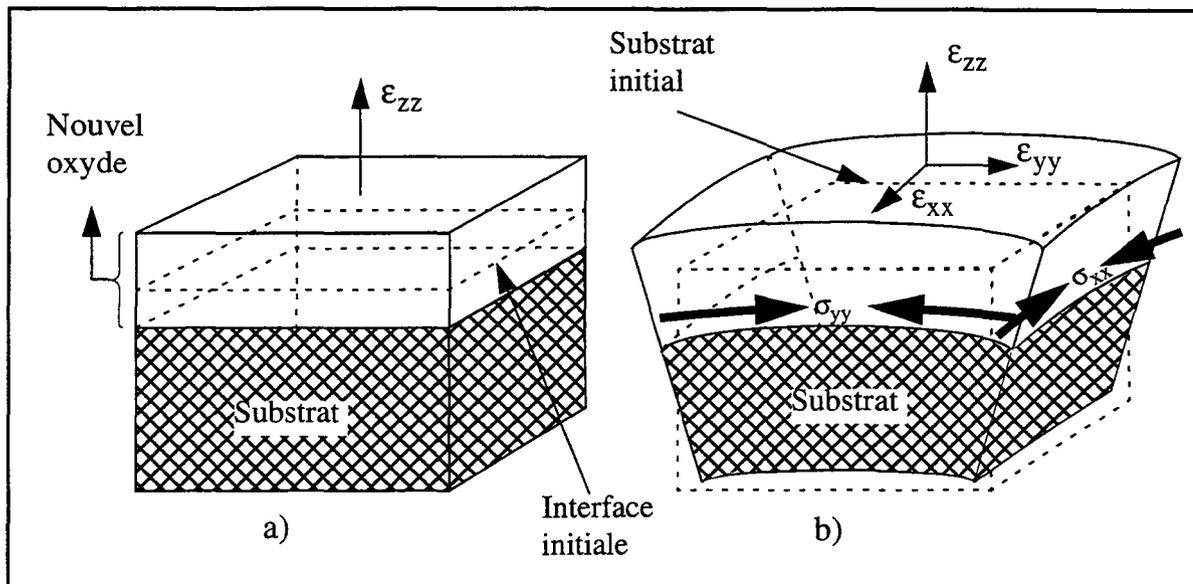


Figure 1 : Schématisation de la déformation de l'oxyde lors de sa croissance : a) croissance uniaxiale, b) dilatation [7].

Enfin, il faut savoir qu'il existe des développements théoriques qui énoncent que l'augmentation de volume se réalise dans la direction normale à l'interface, sans aucune déformation latérale (figure 1a). Le mécanisme proposé par Mott [8] a fait ses preuves pour l'oxydation des métaux. De son côté Hu a proposé une théorie qui aboutit à la même conclusion et, de plus, permet de justifier les phénomènes de diffusion accélérée sous ambiance oxydante (OED) [9].

Etant donné les controverses qui demeurent, les modélisations complète et incomplète considèrent une croissance de l'oxyde uniaxiale, normale à l'interface.

La figure 2 donne les algorithmes des modèles complet et incomplet. Leur structure générale est identique et respecte le schéma classique des modèles d'oxydation (figure 19 du chapitre II). Pour chaque pas de temps, l'étape 1 consiste à résoudre la diffusion des agents oxydants dans des conditions quasi-statiques. La formulation de Deal et Grove de la croissance d'oxyde fournit la vitesse d'oxydation, considérée constante sur un pas de temps et égale à sa valeur en début de pas de temps. Pour le modèle incomplet, ceci permet de calculer le déplacement de l'interface Si/SiO₂ (étape 2).

Dans le cas du modèle complet, cette information permet de définir la couche de silicium consommée par l'oxydation et d'y appliquer un état de précontrainte qui lors de la relaxation de la structure simule l'expansion de la silice.

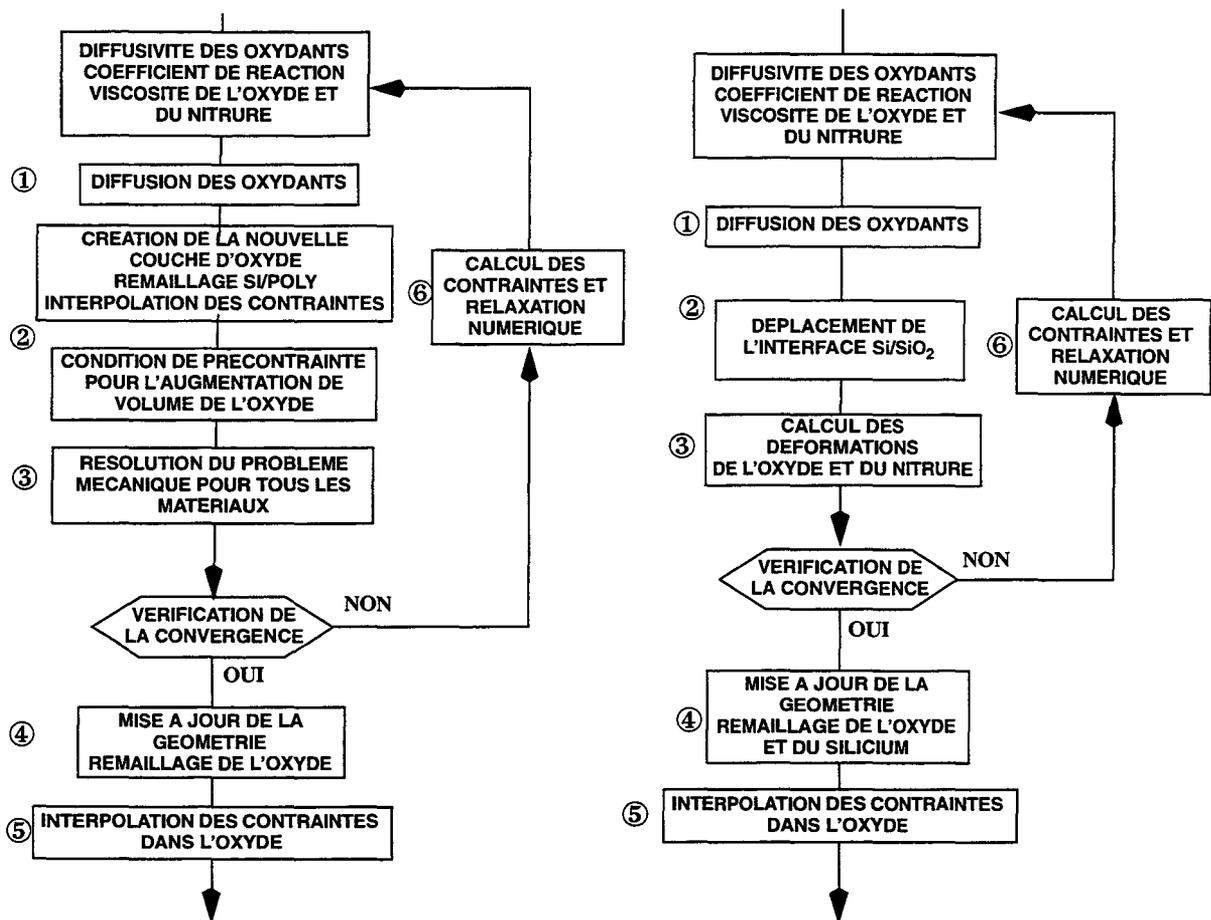


Figure 2 : Algorithmes des modèles d'oxydation implantés dans IMPACT-4 : a) modèle complet, b) modèle incomplet.

L'étape 3 résout l'équation d'équilibre des forces pour l'ensemble des matériaux non rigides. Pour le modèle incomplet, seules les déformations du SiO_2 et du Si_3N_4 sont calculées, le modèle complet inclut également les déformations du silicium et du polysilicium. Lorsque le critère de convergence (identique pour les deux modèles) est atteint, la structure est mise à jour (étape 4) et les contraintes sont interpolées (étape 5). Si la convergence n'est pas atteinte, une procédure de sous-relaxation numérique des contraintes est appliquée (identique pour les deux modèles) et les paramètres dépendant du niveau de contrainte sont mis à jour (étape 6).

2. LE MECANISME D'OXYDATION

Les étapes chronologiques de la cinétique d'oxydation du silicium se résument en deux processus, comme l'illustre la figure 3 pour la formation d'une structure LOCOS : a) La diffusion des espèces oxydantes depuis le gaz ambiant, à travers l'oxyde jusqu'à l'interface, b) La réaction chimique à l'interface et la création du nouvel oxyde qui provoque la déformation de l'ensemble de la structure.

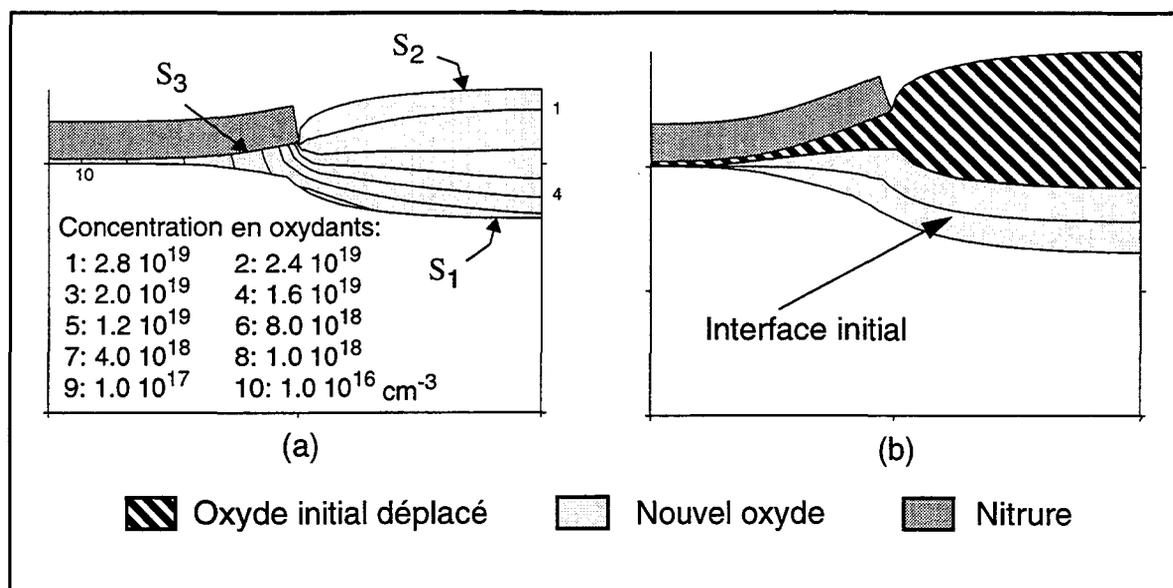


Figure 3 : Mécanismes intervenant dans une oxydation 2D : a) diffusion des agents oxydants dans l'oxyde, b) croissance de l'oxyde et déformation de la structure.

2.1 La diffusion des agents oxydants

La distribution $C(x,y)$ des agents oxydants dans le dioxyde de silicium est obtenue en résolvant une équation de diffusion bidimensionnelle. Cependant, vu les valeurs importantes de diffusivités D_{ox} , l'état stationnaire est instantanément atteint et cette équation se réduit à l'équation de Laplace :

$$D_{ox} \left(\frac{\partial^2 C(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C(x,y)}{\partial y^2} \right) = 0 \quad (2)$$

Le flux aux interfaces oxydés, S_1 (figure 3), est proportionnel à la constante de réaction, k_{si} , comme proposé par le modèle 1D de Deal et Grove. Il correspond à l'absorption d'oxydants par l'oxydation :

$$D_{ox} \nabla C(x, y) \cdot \hat{n}(x, y) = k_{si}(x, y) C(x, y) \quad (3)$$

où $\hat{n}(x, y)$ est le vecteur unitaire normal à la surface.

A la surface S_2 , comme les coefficients de transfert de masse entre l'oxyde et le gaz oxydant prennent des valeurs très importantes, la concentration en agents oxydants est fixée à la limite de solubilité C^* :

$$C(x, y) = C^* \quad (4)$$

Une condition de flux nul est imposée sur les autres surfaces : contact avec le nitrure et limite du domaine de simulation (surface S_3).

$$D_{ox} \nabla C(x, y) \cdot \hat{n}(x, y) = 0 \quad (5)$$

La diffusivité des agents oxydants et la constante de réaction se déduisent directement des constantes linéaires et paraboliques du modèle de Deal et Grove et incluent l'effet de la température, de l'ambiance oxydante et de l'orientation du substrat [10] :

$$D_{ox} = B \cdot N_1 / 2 \cdot C^* \quad (6)$$

$$k_{si} = B/A \cdot N_1 / C^* \quad (7)$$

où N_1 est le nombre d'atomes nécessaires à la formation d'un volume unitaire d'oxyde.

REMARQUE : La constante de réaction à l'interface définie par l'équation (7) dépend de l'orientation cristalline du substrat. Trois orientations sont disponibles dans IMPACT-4 : (100), (110) et (111). Dans le cas d'une oxydation 2D pour laquelle l'axe

Y représente l'orientation (100) du substrat, une pondération du coefficient de réaction est réalisée en fonction de l'orientation de l'interface Si/SiO₂ :

$$k_{si}(\hat{n}) = \frac{N_1}{C^*} \left\{ \left(\frac{B}{A} \right)_{100} + \frac{\left(\frac{B}{A} \right)_{111} - \left(\frac{B}{A} \right)_{100}}{54,7} \times \Delta \right\} \quad 0 \leq \Delta \leq 54,7 \quad (8)$$

$$k_{si}(\hat{n}) = \frac{N_1}{C^*} \left\{ \left(\frac{B}{A} \right)_{111} + \frac{\left(\frac{B}{A} \right)_{110} - \left(\frac{B}{A} \right)_{111}}{35,3} \times (\Delta - 54,7) \right\} \quad 54,7 \leq \Delta \leq 90 \quad (9)$$

où Δ correspond à l'angle entre la direction (100) (axe Y) et la direction de la normale à l'interface.

Les vitesses d'oxydation le long de l'interface Si/SiO₂ sont calculées par le rapport entre le flux d'oxydants absorbés et le nombre d'atomes N_1 :

$$\vec{V}_{ox} = -\frac{k_{si}C(x,y)}{N_1} \hat{n}(x,y) \quad (10)$$

Pour une configuration 1D, la formation d'une épaisseur $V_{OX}.\Delta T$ d'oxyde consomme une épaisseur $\alpha.V_{OX}.\Delta T$ de silicium et s'accompagne d'un déplacement vertical de l'oxyde initial de la quantité $(1-\alpha).V_{OX}.\Delta T$, α étant le rapport des volumes d'une mole de silicium et d'oxyde.

Pour une configuration 2D, comme le montre la figure 3, la détermination de la topologie après un pas d'oxydation nécessite une approche numérique basée sur un calcul de structures. Les déformations de la géométrie liées à l'augmentation de volume imposée à l'interface sont calculées pour l'ancien oxyde et la couche de nitrure dans le cas du modèle incomplet et pour l'ensemble des matériaux dans le cas du modèle complet.

2.2 Formulation et résolution du problème mécanique

2.2.1 Contraintes et déformations : définition des variables

Les bases de la formulation d'un problème mécanique sont données par la définition des champs de contraintes, de déplacements [11] et des relations qui les unissent. Ce problème est typiquement tri-dimensionnel. Cependant, dans l'étude qui nous concerne, la théorie peut-être très largement simplifiée dans la mesure où nous ne considérons que des déformations planes. De plus, étant donné l'échelle macroscopique de notre modélisation, tous les matériaux sont considérés comme isotropes et homogènes. Enfin, le traitement numérique incrémental du problème permet de considérer valide l'hypothèse des petites déformations et petits déplacements.

□ Tenseur des contraintes

L'action de forces extérieures surfaciques (ex : pression hydrostatique) ou massiques (ex : gravitation ou forces magnétiques) sur un corps en équilibre crée des forces intérieures, conséquences des mouvements relatifs des particules constitutives de ce corps. La grandeur de ces forces est généralement définie par leur intensité, c'est à dire la force agissant sur l'unité de surface, que l'on appelle contrainte, définie par un tenseur.

Considérons simplement une partie élémentaire ayant la forme d'un carré, dont les côtés sont parallèles aux axes de coordonnées. Les notations employées pour désigner les composantes du tenseur des contraintes sont indiquées à la figure 4. σ_{xx} et σ_{yy} sont appelées composantes normales de la contrainte, σ_{xy} , σ_{yx} sont les composantes de cisaillement. Les composantes normales sont considérées comme positives lorsqu'elles agissent en tension et négatives lorsqu'elles agissent en compression.

Comme tout tenseur, le tenseur des contraintes peut être séparé en deux parties :

a) La composante sphérique ou de dilatation [σ^v]

$$[\sigma^v] = \frac{1}{3} \text{trace} [\sigma_{ij}] [I] \quad (11)$$

où [σ_{ij}] est le tenseur total et [I] est le tenseur unité

b) La composante de déviation ou déviateur $[\sigma^s]$

$$[\sigma^s] = [\sigma_{ij}] - [\sigma^v] \quad (12)$$

REMARQUE : De la même manière, le tenseur des déformations est également décomposable en une partie sphérique, ϵ^v , et une partie de déviation, ϵ^s .

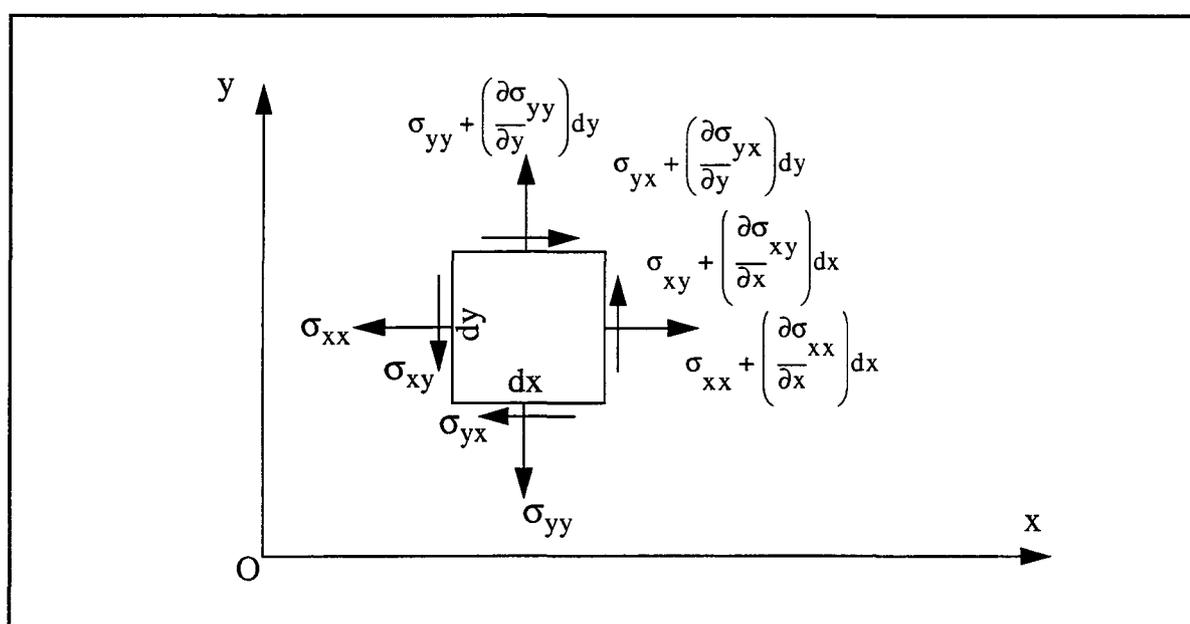


Figure 4 : Définition du champ de contraintes.

Etant donné la symétrie du tenseur des contraintes et le cas de déformations planes, la contrainte agissant dans un plan quelconque passant par un point O est entièrement définie par la donnée des composantes σ_{xx} , σ_{yy} et σ_{xy} de la contrainte en ce point. La formule de changement de repère permet d'exprimer la contrainte dans un plan quelconque, on parle alors de contraintes de "Cauchy" :

$$[\sigma_{\text{Cauchy}}] = [{}^t\mathbf{P}] [\sigma] [\mathbf{P}] \quad (13)$$

où $[\mathbf{P}]$ est la matrice de passage.

En particulier, il existe toujours un repère orthonormé dans lequel la composante de cisaillement du tenseur des contraintes est nulle. Ce repère définit les directions principales et les contraintes normales correspondantes sont appelées contraintes principales. Ce repère principal est très important dans la définition des critères de limite d'un comportement mécanique. Le critère permet de définir conventionnellement un état limite de chargement au-delà duquel le matériau change de comportement. A titre d'exemple, les critères de Tresca (ou du cisaillement maximum) et de Von Mises sont exposés [12].

On dit qu'un matériau obéit au critère de Tresca si la valeur maximale de la composante de cisaillement reste inférieure à une valeur fixée. Dans un repère principal, on montre que le cisaillement est maximal sur les plans passant par chacun des axes principaux et bissecteurs de l'angle que font les deux autres axes principaux. Dans ce cas, le cisaillement maximal est égal à :

$$\sigma_{\max} = \pm \frac{1}{2} (\sigma_{ii} - \sigma_{jj}) \quad i \neq j \quad i \text{ et } j=x,y \text{ ou } z \quad (14)$$

Dans le cas des déformations planes et dans un repère quelconque, la représentation de Mohr permet de déterminer aisément le cisaillement maximal [13] :

$$\sigma_{\max} = \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma_{xx} - \sigma_{yy}}{2}\right)^2 + \sigma_{xy}^2} \quad (15)$$

Le critère de Tresca impose $\sigma_{\max} < \sigma_0$, σ_0 étant fonction du matériau.

Le critère de Von Mises impose une valeur maximale à la contrainte de cisaillement octaédrique encore appelée contrainte de cisaillement de Von Mises. Le cisaillement octaédrique se définit dans le repère principal comme suit (figure 5) : Δ étant l'axe trisecteur des axes principaux x , y et z , le plan Π , orthogonal à cet axe, défini par $OA = OB = OC$ est un plan dit octaédrique, puisqu'il correspond à une des faces d'un octaèdre régulier, centré en O , dont les sommets sont sur les axes principaux. On peut montrer que dans le repère principal, Δ représente la partie sphérique du tenseur, et Π son déviateur.

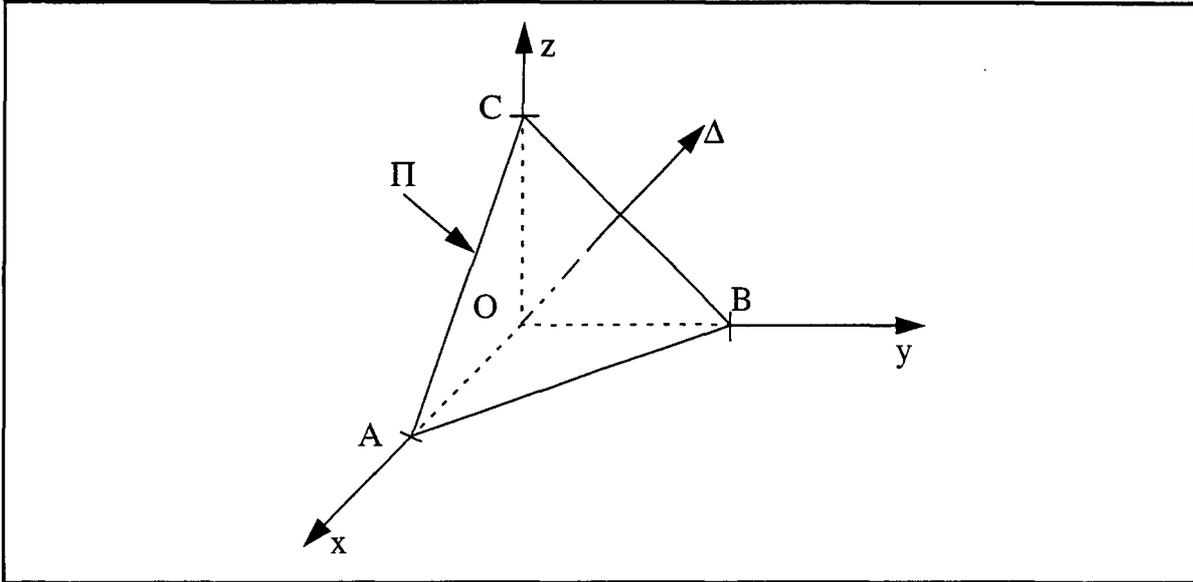


Figure 5 : Définition de l'axe hydrostatique Δ et du plan octaédrique Π dans un repère principal.

Dans le repère principal, la contrainte de cisaillement octaédrique est égale à :

$$\sigma_{\text{oct}} = \pm \frac{1}{3} \sqrt{(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^2} \quad (16)$$

Le critère de Von Mises impose $\sigma_{\text{oct}} < \sigma_0$, σ_0 étant fonction du matériau.

□ Tenseur linéarisé des déformations :

Suite à l'action des forces extérieures, les particules d'un corps se déplacent les unes par rapport aux autres, entraînant localement une variation relative de forme appelée déformation. On distingue les variations de longueurs et les variations angulaires. La déformation d'un corps est définie par la donnée de son tenseur de déformation. Si les déplacements sont infiniment petits, le tenseur des déformations peut-être linéarisé par rapport à ces déplacements. Les termes diagonaux ϵ_{ii} de ce tenseur correspondent à la variation relative de longueur dans la direction i , les termes extra-diago-

naux ε_{ij} correspondent à la variation d'angle dans le plan (i, j). Dans le cas de déformation plane la définition du champ de déplacements est donnée en figure 6.

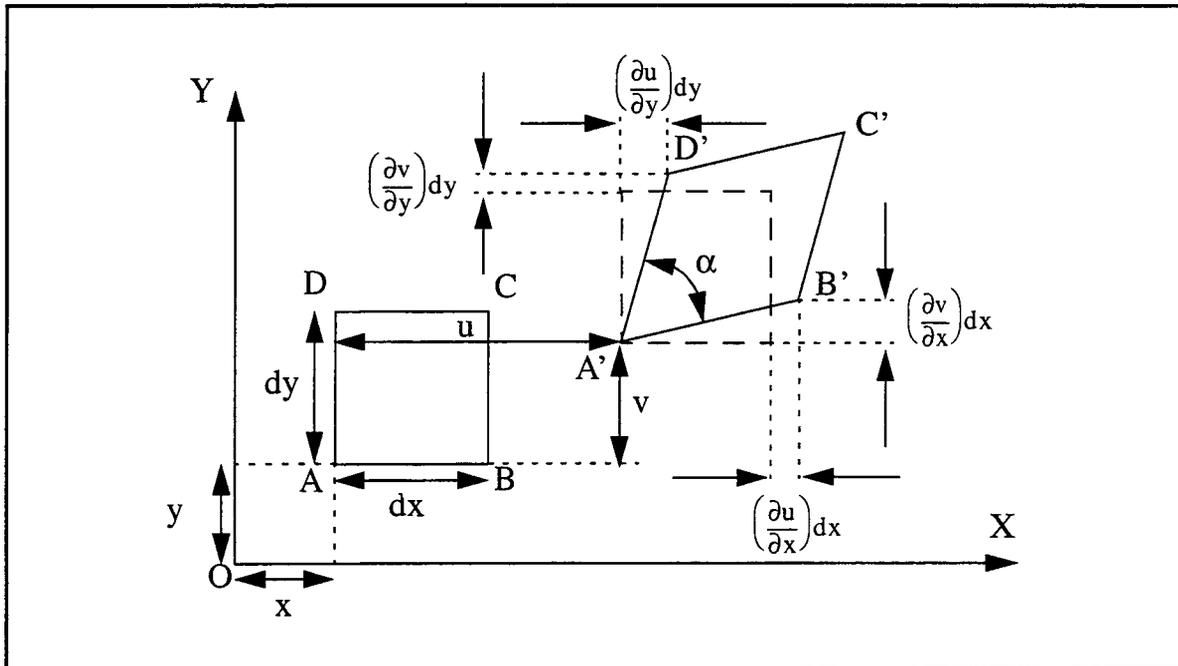


Figure 6 : Définition du champ de déplacements : u et v sont les déplacements dans les directions x et y, respectivement.

Les déformations s'expriment alors comme suit :

$$\varepsilon_{xx} = \frac{du}{dx} \quad (17)$$

$$\varepsilon_{yy} = \frac{dv}{dy} \quad (18)$$

$$\varepsilon_{xy} = \frac{du}{dy} + \frac{dv}{dx} = \frac{\pi}{2} - \alpha \quad (19)$$

REMARQUE : On peut montrer que le tenseur des déformations est symétrique.

La modélisation du comportement mécanique d'un matériau ou RHEOLOGIE, consiste à définir les relations qui unissent contrainte et déformation. Dans le cas particulier des déformations planes, il s'agit de définir une matrice de rigidité [D] telle que :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = [D] \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (20)$$

2.2.2 Expression de la sollicitation initiale

La déformation mécanique de la structure est le résultat de la sollicitation initiale, imposée par la vitesse d'oxydation le long de l'interface donnée par l'équation (10).

Dans le cas du modèle incomplet, elle se traduit par un champ de déplacements $U(x,y)$ normal à l'interface oxydée (expansion uniaxiale du volume) (figure 7a) :

$$U(x, y) = \left| \vec{V}_{ox}(x, y) \right| \Delta T \quad (21)$$

Dans le cas du modèle complet, on impose une précontrainte de compression dans la couche de silicium qui a été consommée correspondant à l'expansion uniaxiale du nouvel oxyde (figure 7b). Considérant que l'oxyde en expansion est purement élastique, il en résulte que la précontrainte est égale à :

$$\sigma^v = -\chi \frac{(1 - \alpha)}{\alpha} \quad \sigma^s = -G \frac{(1 - \alpha)}{\alpha} \quad (22)$$

σ^v et σ^s sont respectivement les composantes de dilatation et de déviation, α est le rapport volumique de la réaction, χ et G sont respectivement les modules de compressibilité et de rigidité de l'oxyde. La structure se relaxe ensuite vers un état d'équilibre en fonction des propriétés mécaniques (rhéologiques) de chaque matériau,

ce qui se traduit macroscopiquement par un écoulement liquide ou une déformation solide.

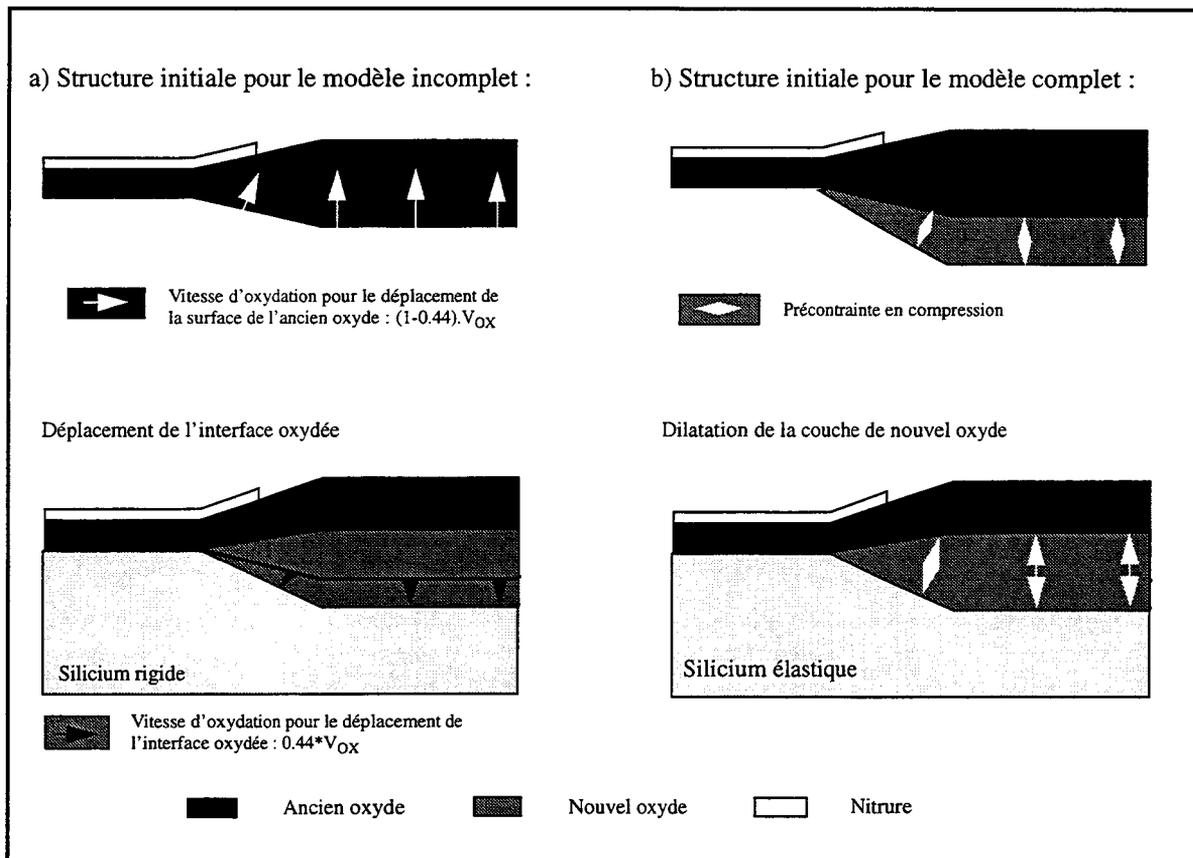


Figure 7 : Principe de sollicitation mécanique de la structure pour a) le modèle incomplet, b) le modèle complet.

2.2.3 RHEOLOGIE des matériaux [14]

Ce paragraphe expose les comportements mécaniques possibles des matériaux entrant en jeu dans la fabrication des circuits intégrés. La formulation des équations d'états rhéologiques est basée sur les relations liant contraintes et déformations. Comme nous l'avons vu, d'après la théorie générale des tenseurs [11], toute déformation peut-être décomposée en deux composantes : la partie de dilatation ϵ^V , qui tient compte des modifications de volume (expansion ou compression), et la partie de déviation, ϵ^S , qui ne prend en compte que les changements de formes. Par conséquent, le

comportement d'un matériau est défini par la détermination de deux relations :

$$R^v(\sigma^v, \dot{\sigma}^v, \varepsilon^v, \dot{\varepsilon}^v) = 0 \quad (23)$$

$$R^s(\sigma^s, \dot{\sigma}^s, \varepsilon^s, \dot{\varepsilon}^s) = 0 \quad (24)$$

où R est l'équation d'état rhéologique, σ , $\dot{\sigma}$, ε , $\dot{\varepsilon}$ sont respectivement les contraintes, vitesse d'application des contraintes, déformation et vitesse de déformation et les exposants "v" et "s" représentent les composants de dilatation et déviation.

La nature du corps, solide ou liquide, dépend de la composante de déviation. Si les contraintes peuvent se relaxer via un écoulement ou une déformation irréversible alors le matériau est un liquide. Dans le cas contraire, c'est un solide.

On a l'habitude de représenter les comportements rhéologiques par des modèles analogiques qui sont des combinaisons d'éléments mécaniques simples tels le ressort ou l'amortisseur, dont les réponses à des sollicitations sont similaires à celles des matériaux [15]. Par exemple, le ressort représente un comportement purement élastique, caractérisé par une relation linéaire entre les contraintes et les déformations. L'amortisseur quant à lui traduit un comportement liquide purement visqueux où les contraintes sont linéairement fonction de la vitesse de déformation. Il existe d'autres éléments tels que le patin qui schématise un seuil de contrainte et la butée qui schématise un seuil de déformation.

Les lois de Hooke et de Newton pour les corps élastiques et visqueux, respectivement, sont les équations d'états rhéologiques les plus connues.

En utilisant les conventions exposées ci-dessus, un solide de Hooke est décrit par les deux relations suivantes :

$$R^v : \sigma^v - \chi \varepsilon^v = 0 \quad (25)$$

$$R^s : \sigma^s - G \varepsilon^s = 0 \quad (26)$$

où χ et G sont respectivement les modules de compressibilité et de rigi-

dité du corps. Le modèle analogique correspondant est donné dans la table I, qui résume les principaux comportements mécaniques.

Le liquide de Newton est exprimé par :

$$R^V : \sigma^V - \chi \varepsilon^V = 0 \quad (27)$$

$$R^S : \sigma^S - \eta \dot{\varepsilon}^S = 0 \quad (28)$$

où χ et η sont respectivement le module de compressibilité et la viscosité du liquide. Lorsqu'un matériau se comporte comme un liquide de Newton, les déformations en cisaillement (incluses uniquement dans la composante de déviation du tenseur) sont beaucoup plus importantes que les déformations volumétriques. Par conséquent, l'équation d'état du liquide de Newton peut se résumer à l'expression de R^S et le matériau est considéré comme un liquide visqueux incompressible (équation de Navier-Stokes).

Cependant, les matériaux utilisés dans la fabrication des circuits intégrés ne sont ni des corps purement élastiques ni des liquides visqueux. En effet, leur comportement mécanique dépend de la température. A basse température (inférieure à 800°C), ils se comportent comme des solides élastiques alors qu'au dessus de 1000°C, ce sont des liquides visqueux [16 et 4]. Entre ces deux comportements extrêmes, ils présentent des caractéristiques mécaniques plus complexes. Un comportement viscoélastique doit leur être appliqué. Celui-ci a la particularité de pouvoir à la fois subir des déformations élastiques réversibles et des déformations irréversibles visqueuses.

La notion de viscoélasticité peut se représenter par deux types de combinaison de ressort et de piston. La première correspond à un ressort connecté en parallèle avec l'amortisseur et est appelé élément de Kelvin-Voigt. La relation contrainte-déformation de cet élément est :

$$\sigma - (\chi \varepsilon + \eta \dot{\varepsilon}) = 0 \quad (29)$$

Cependant, ce comportement reste de type élastique. En effet, si l'on applique subitement une contrainte à cet élément, aucune déformation instantanée n'est

possible, due à la présence du piston. Après un laps de temps suffisamment grand par rapport à la constante de temps caractéristique ($\tau=\eta/\chi$), l'élément subit une déformation: $\varepsilon = \sigma/\chi$, purement élastique. De plus, lorsque l'état de charge est retiré, l'élément retrouve sa forme initiale. Il s'agit donc d'un comportement élastique différé.

L'élément de Kelvin-Voigt peut être introduit dans les deux équations d'état R^V et R^S (Table I). S'il représente la composante de déviation R^S du tenseur des contraintes et, est associé à un ressort pour la partie de dilatation, alors le comportement résultant est celui d'un solide de Kelvin-Voigt. Il s'agit bien d'un solide, puisque ni la composante de dilatation, ni celle de déviation ne peuvent se relaxer.

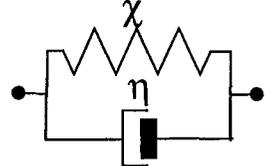
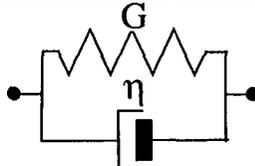
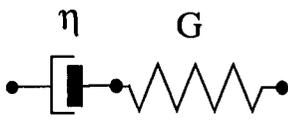
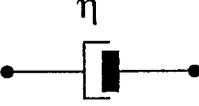
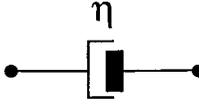
Néanmoins, l'élément de Kelvin-Voigt peut aussi modéliser la composante R^V . En association avec un amortisseur pour la composante de déviation R^S , il correspond au comportement proposé par Rafferty [17]. La relaxation instantanée des contraintes permises par R^S , donne à ce comportement un caractère liquide. L'effet d'élasticité différé introduit par R^V permet de modéliser les mesures expérimentales de Rafferty démontrant une densification de l'oxyde suite à un recuit à haute température.

Le second comportement viscoélastique correspond à un ressort connecté en série avec un piston et est appelé élément de Maxwell. L'équation caractéristique liant contrainte et déformation est :

$$\dot{\varepsilon} - \left(\frac{\dot{\sigma}}{G} + \frac{\sigma}{\eta} \right) = 0 \quad (30)$$

Un tel élément peut subir une déformation instantanée lorsqu'on lui applique un état de contrainte. De plus, il permet une relaxation des contraintes dans le temps, fonction de la constante de temps caractéristique de l'élément ($\tau=\eta/G$). En effet, d'après la théorie de Maxwell, aucun fluide ne peut se relaxer instantanément sous un état de déformation constant [18]. L'élément de Maxwell est habituellement utilisé pour modéliser R^S et est associé à un ressort pour la composante de dilatation. L'ensemble constitue le liquide de Maxwell.

Table I: Modèles analogiques pour les principaux comportements rhéologiques. χ , G et η sont respectivement les modules de compressibilité, de rigidité et la viscosité du matériau.

| Nature du matériau | SOLIDE | | LIQUIDE | | |
|-----------------------------------|---|---|---|---|---|
| | ELASTIQUE | VISCOELASTIQUE | | | VISQUEUX |
| | Hooke | Kelvin-Voigt | Maxwell | utilisé par ^a | Newton |
| Composante de dilatation R^v | χ  | χ  | χ  |  | χ  |
| Composante de déviation R^s | G  | G  | η G  | η  | η  |

^a Confère référence [17]

Les matériaux utilisés en technologie silicium exhibent des caractéristiques élastiques sous un état de contraintes hydrostatique et possèdent une tendance à l'écoulement sous un état de contraintes en déviation [15]. En terme de modèles rhéologiques, ils se comportent comme des liquides. Par conséquent, les solides de Hooke et Kelvin-Voigt ne sont pas indiqués pour la modélisation de leur comportement. Deux modélisations sont donc envisageables : le liquide de Newton ou celui de Maxwell.

Le grand avantage du fluide de Maxwell est qu'il prend en compte avec exactitude le temps de relaxation des contraintes. Ce matériau viscoélastique a la propriété de garder en mémoire l'historique des états de contraintes qu'il a subit. Cette formulation est la plus générale puisqu'elle est équivalente à une modélisation de Newton lorsque la viscosité du matériau est faible. Il est égal à un comportement élastique dans le cas contraire. Cette dernière caractéristique est absolument nécessaire pour la simulation de l'oxydation sèche du silicium à basse température.

De l'autre côté, le liquide de Newton relaxe instantanément toutes les contraintes et la réponse de ce corps à une sollicitation ne dépend que de la vitesse de déformation instantanée. Comme le temps de relaxation des contraintes est proportionnel à la viscosité du matériau, le comportement de Newton n'est valable que pour la modélisation de matériaux à faible viscosité. Dans ce sens, le modèle utilisé par Rafferty est une extension du fluide de Newton.

L'analyse détaillée des modèles de Maxwell et Newton et leur comparaison est effectuée au chapitre IV. Elle justifie leurs domaines de validité.

Pour compléter cette modélisation rhéologique, il est nécessaire de se rappeler que les mesures de viscosité de la silice en volume [19] donnent des valeurs très élevées même à haute température ($\sim 10^{18}$ Poises à 1000°C). Si l'on considère que la viscosité ne varie qu'en fonction de la température, de la teneur en radicaux -OH dans l'oxyde [20 et 21] et du pourcentage de composants halogénés dans le gaz oxydant [22 et 23], les niveaux de contraintes générales autour des coins de tranchées devraient provoquer des dislocations du silicium étant donné le temps de relaxation gigantesque qu'il leur faudrait pour revenir à un niveau raisonnable. Or, tout au contraire, on observe des déformations très importantes de l'oxyde à ces coins et aucune dislocation dans le substrat [24 à 25]. Ceci suggère que la viscosité diminue au fur et à mesure que les contraintes dans l'oxyde augmentent. En d'autres termes, l'écoulement de l'oxyde n'est pas Newtonien (à viscosité constante) et la silice est un matériau non linéaire. Il existe de nombreux types d'écoulement non linéaire (figure 8a) : Il y a fluidification lorsque la viscosité diminue avec une augmentation de la vitesse de déformation. Dans le cas contraire, on observe un épaissement [26].

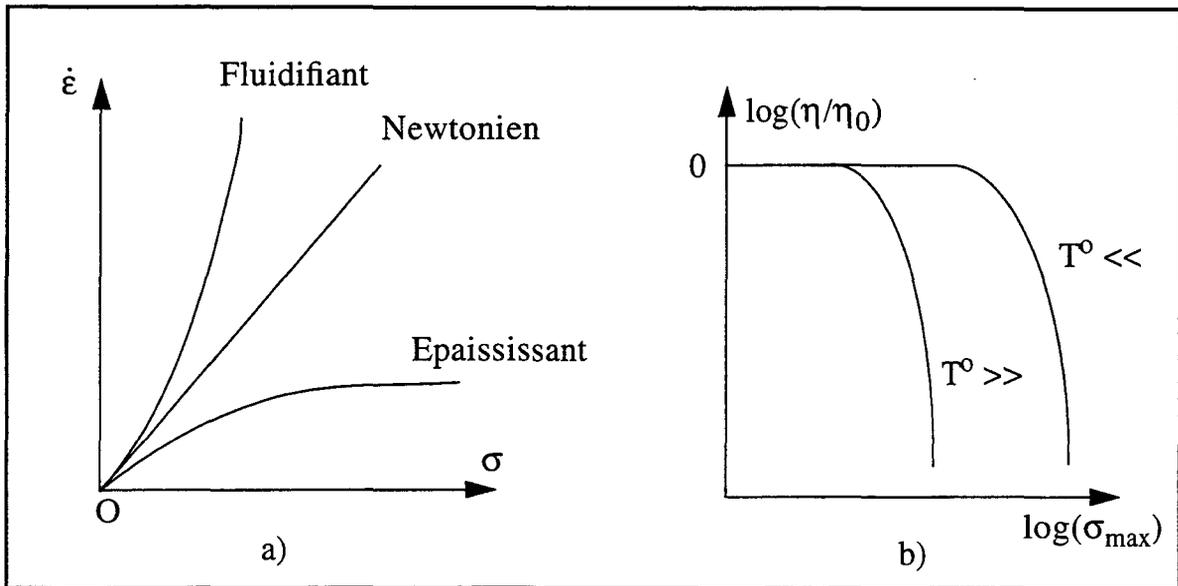


Figure 8 : Comportements rhéologiques non-linéaires : a) différents types d'écoulements, b) variation de la viscosité en fonction des contraintes de cisaillement pour le modèle de Eyring.

Dans le cas du dioxyde de silicium, la modélisation d'Eyring, fluidifiante, est la plus appropriée [27] :

$$\eta = \eta_0 \frac{\left(\frac{\sigma_{max}}{\sigma_0} \right)}{\sinh \left(\frac{\sigma_{max}}{\sigma_0} \right)} \quad (31)$$

où η_0 est la viscosité de l'oxyde à faible niveau de contrainte, σ_{max} est la contrainte de cisaillement maximale et σ_0 est une valeur critique du cisaillement au-delà de laquelle le matériau perd son caractère linéaire. Plus la température est élevée, plus ce seuil est bas (figure 8b). D'après la théorie d'Eyring, σ_0 correspond au travail nécessaire que doivent fournir les contraintes de cisaillement pour rompre les molécules du matériau :

$$\sigma_0 = \frac{2KT}{V_c} \quad (32)$$

avec K la constante de Boltzmann, T la température et V_c le volume unitaire d'activation dans lequel ont lieu les réarrangements atomiques sous contrainte.

Mais des expériences [25] ont montré qu'il était nécessaire d'utiliser V_c comme un paramètre d'ajustement pour obtenir de bons accords.

REMARQUE : On peut comparer ce comportement non-linéaire au comportement élasto-visco-plastique pour lequel, tant que le déviateur du tenseur des contraintes (exprimé en terme de contrainte de cisaillement maximale ou de contrainte octaédrique) est inférieur à une certaine valeur caractéristique du matériau, le matériau est purement élastique. Au delà, il subit des déformations plastiques irréversibles (critères de Tresca ou Von Mises). C'est pourquoi on a l'habitude d'appeler V_c : volume d'activation de la plasticité. De même, lorsque $\sigma_{\max} > \sigma_0$, on dira que l'oxyde entre en régime plastique.

Un modèle analogique du comportement élasto-visco-plastique est celui de Bingham-Norton qui inclut un élément nouveau, le patin, pour schématiser le seuil de contrainte σ_0 (figure 9a) [28]. Avec la même notation, le modèle viscoélastique non-linéaire est rappelé en figure 9b :

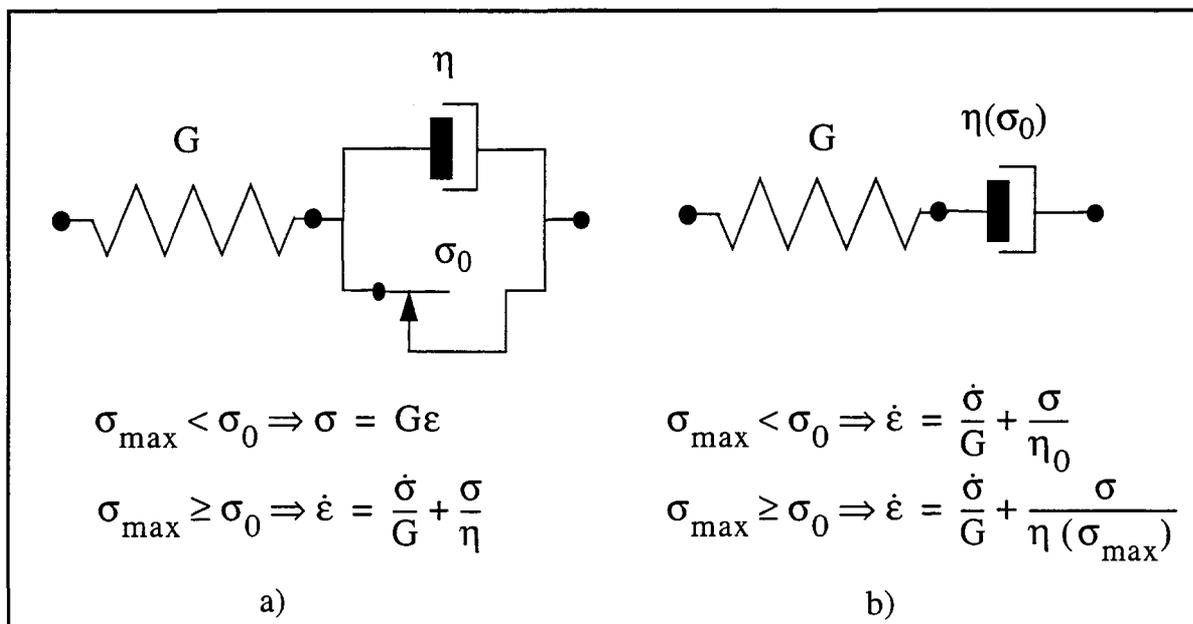


Figure 9 : Comparaison des modèles analogiques de a) l'élastoplasticité et b) la viscoélasticité non-linéaire.

En résumé, le comportement rhéologique le plus complet qui puisse s'appliquer aux matériaux de la filière silicium est un comportement viscoélastique non linéaire. C'est celui que nous avons adopté pour le dioxyde et le nitrure de silicium. Pour

les matériaux oxydés, étant donné leur plus grande rigidité face à la silice et au nitrure, leur modélisation reste celle des corps purement élastiques (cas du modèle complet). Cependant, certains auteurs [29] tiennent compte, grâce à un modèle de Bingham-Norton, du caractère élasto-plastique observé expérimentalement pour le silicium [30].

2.2.4 Formulation du principe d'équilibre

L'application de la relation fondamentale de la dynamique à la structure étudiée permet de définir deux relations d'équilibre dans les directions x et y :

$$\frac{d\sigma_{xx}}{dx} + \frac{d\sigma_{xy}}{dy} + F_x = 0 \quad (33)$$

$$\frac{d\sigma_{yy}}{dy} + \frac{d\sigma_{xy}}{dx} + F_y = 0 \quad (34)$$

avec \vec{F} (F_x, F_y) forces massiques ou surfaciques agissant sur la structure. Ces forces correspondent soit à des tensions de surface (phénomène de fluage), soit aux contraintes dues aux différences des coefficients thermiques de dilatation des matériaux (chocs thermiques). Pour le problème de l'oxydation à température constante, on considère que $\vec{F} = \vec{0}$.

La résolution des équations (33) et (34) nécessite d'exprimer les contraintes σ_{xx} , σ_{yy} et σ_{xy} en fonction des déformations correspondantes. Dans le cas du silicium et du polysilicium, il s'agit des lois de Hooke (modèle complet):

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \left(\chi \times \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + G \times \begin{bmatrix} \frac{4}{3} & -\frac{2}{3} & 0 \\ -\frac{2}{3} & \frac{4}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (35)$$

avec χ et G , les modules de compressibilité et de rigidité, qui s'expriment

en fonction du module d'Young E et du coefficient de Poisson ν selon les relations :

$$\chi = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (36)$$

Le premier tenseur dans le membre droit de l'équation (35) correspond à la composante de dilatation du tenseur des contraintes, le second correspond au déviateur. Les constantes élastiques utilisées dans ce travail sont rappelées au tableau II.

Table II : Constantes élastiques des matériaux [31].

| Matériau | E (dyne/cm ²) | ν |
|--------------------------------|---------------------------|-------|
| SiO ₂ | 0.66 10 ¹² | 0.17 |
| Si ₃ N ₄ | 3.89 10 ¹² | 0.30 |
| Si et Poly-Si | 1.87 10 ¹² | 0.28 |

Pour le dioxyde et le nitrure de silicium, il est nécessaire d'introduire la viscoélasticité dans le second tenseur du membre de droite de l'équation (35). Ceci est effectué à partir du formalisme de l'élasticité linéaire en utilisant des coefficients d'élasticité effectifs. En effet, d'après le tableau I, l'expression du déviateur des contraintes dans un fluide de Maxwell est donnée par l'équation :

$$\dot{\epsilon}^s - \left(\frac{\dot{\sigma}^s}{G} + \frac{\sigma^s}{\eta} \right) = 0 \quad (37)$$

La résolution de cette équation donne l'évolution temporelle de la contrainte en fonction de la vitesse de déformation :

$$\sigma(t) = \sigma_0 \exp\left(-\frac{t-t_0}{\tau_R}\right) + \int_{t_0}^t G \exp\left(-\frac{t-\tau}{\tau_R}\right) \dot{\epsilon} d\tau \quad \text{avec } \tau_R = \frac{\eta}{G} \quad (38)$$

dans laquelle σ_0 est la précontrainte existante au temps t_0 et τ_R , le temps de relaxation.

Dans la simulation, et suite à la discrétisation temporelle, la vitesse de déformation est prise constante [32] sur un incrément de temps ΔT , ($\dot{\epsilon} = \epsilon/\Delta T$), le second terme du membre de droite de l'équation (38) s'écrit alors directement sous la forme :

$$\sigma(t) = G_{\text{eff}} \cdot \epsilon \quad \text{avec} \quad G_{\text{eff}} = G \cdot \frac{\tau_R}{\Delta T} \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta T}{\tau_R}\right) \right) \quad (39)$$

Cette dernière relation montre que la viscoélasticité introduite par le modèle de Maxwell peut-être directement modélisée par une rigidité effective, G_{eff} , dans le terme de déviation des contraintes, équation (35).

Ce formalisme permet de retrouver les comportements mécaniques "classiques" en fonction de la température. En effet, lorsque la température est basse ($T^0 < 800^\circ\text{C}$), alors la viscosité η est très importante, donc le temps de relaxation τ_R est grand. D'où

$$G_{\text{eff}} \approx \frac{\eta}{\Delta T} \left(1 - \left(1 - \frac{\Delta T}{\tau_R} \right) \right) = \frac{\eta}{\tau_R} = G \quad (40)$$

On retrouve le comportement purement élastique.

Au contraire, si la température est élevée ($T > 1050^\circ\text{C}$), alors la viscosité η est faible, donc le temps de relaxation est petit. D'où

$$G_{\text{eff}} \approx \frac{G\tau_R}{\Delta T} = \frac{\eta}{\Delta T} < G \quad (41)$$

Or, comme le module de compressibilité χ est du même ordre que G , la relation (41) indique que le rapport G_{eff}/χ tend vers zéro, ce qui, dans le formalisme de l'élasticité se traduit par une condition d'incompressibilité ($\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} = 0$). D'où, avec ces

deux hypothèses (incompressibilité + faible viscosité), l'équation (35) se réécrit

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \left(\chi \times \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \frac{\eta}{\Delta T} \times \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (42)$$

Or par définition la pression est égale à $p = -\chi (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})$.

De plus si ΔT est petit :

$$\frac{\varepsilon_{xx}}{\Delta T} = \frac{d}{dx} V_{xx}, \quad \frac{\varepsilon_{yy}}{\Delta T} = \frac{dV}{dy}_{yy} \quad \text{et} \quad \frac{\varepsilon_{xy}}{\Delta T} = \frac{d}{dy} V_{xx} + \frac{d}{dx} V_{yy} \quad (43)$$

d'où l'équation (42) devient

$$\sigma_{xx} = -p + 2\eta \frac{d}{dx} V_{xx} \quad (44)$$

$$\sigma_{yy} = -p + 2\eta \frac{d}{dy} V_{yy} \quad (45)$$

$$\sigma_{xy} = \eta \left(\frac{d}{dy} V_{xx} + \frac{d}{dx} V_{yy} \right) \quad (46)$$

Utilisant les équations d'équilibre (33) et (34), on retrouve les équations de Navier-Stokes valables pour les liquides incompressibles :

$$-\frac{d}{dx} p + \eta \left(\frac{d^2}{dx^2} V_{xx} + \frac{d^2}{dy^2} V_{xx} \right) = 0 \quad (47)$$

$$-\frac{d}{dy} p + \eta \left(\frac{d^2}{dx^2} V_{yy} + \frac{d^2}{dy^2} V_{yy} \right) = 0 \quad (48)$$

Cette formulation de la viscoélasticité permet donc d'obtenir une modélisation continue du comportement mécanique d'un régime purement élastique jusqu'au régime visqueux incompressible. La nature du comportement dépend uniquement de la valeur de la viscosité sur le pas de temps considéré.

Etant donné le caractère viscoélastique de la déformation, l'histoire des contraintes doit être maintenue. Comme la simulation d'une étape d'oxydation est divisée en une succession de pas de temps, il est nécessaire d'accumuler les contraintes résiduelles présentes à chaque fin de pas de temps. L'expression des contraintes à la fin d'un pas de temps (n) est donnée par la somme : 1) des contraintes générées durant le pas de temps courant, dues à la déformation (ε_n); 2) le résidu de contraintes des (n-1) étapes précédentes. Ceci correspond à l'équation (49) pour la composante de dilatation des contraintes et l'équation (50) pour la partie de déviation :

$$\sigma_n^v = \chi \times \varepsilon_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i^v \quad (49)$$

$$\sigma_n^s = G_{\text{eff}} \times \varepsilon_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i^s \times e^{-\frac{i \times \Delta T}{\tau_r}} \quad (50)$$

Ces relations montrent que seules les contraintes de déviation [σ^s] se relaxent, les contraintes de dilatation [σ^v] purement élastiques s'additionnent.

2.2.5 Effet des contraintes

La vitesse d'oxydation dépend de la diffusivité des agents oxydants, de leur solubilité et du coefficient de réaction à l'interface. Les observations expérimentales démontrant une réduction de la cinétique d'oxydation (§ 1.3.2 du chapitre II) ont permis de conclure que ce sont les contraintes mécaniques qui sont responsables de ces perturbations.

Les expériences de Kao [33] ont montré que l'oxyde en croissance sur un substrat convexe est en compression radiale et tension tangentielle (figure 10a). Comme

les contraintes tangentielles sont supérieures aux contraintes normales, l'oxyde se trouve dans un état de tension (pression négative). Au contraire, sur un substrat concave, l'oxyde croît en compression radiale et tangentielle (figure 10b). Sa pression interne est donc positive (état de compression).

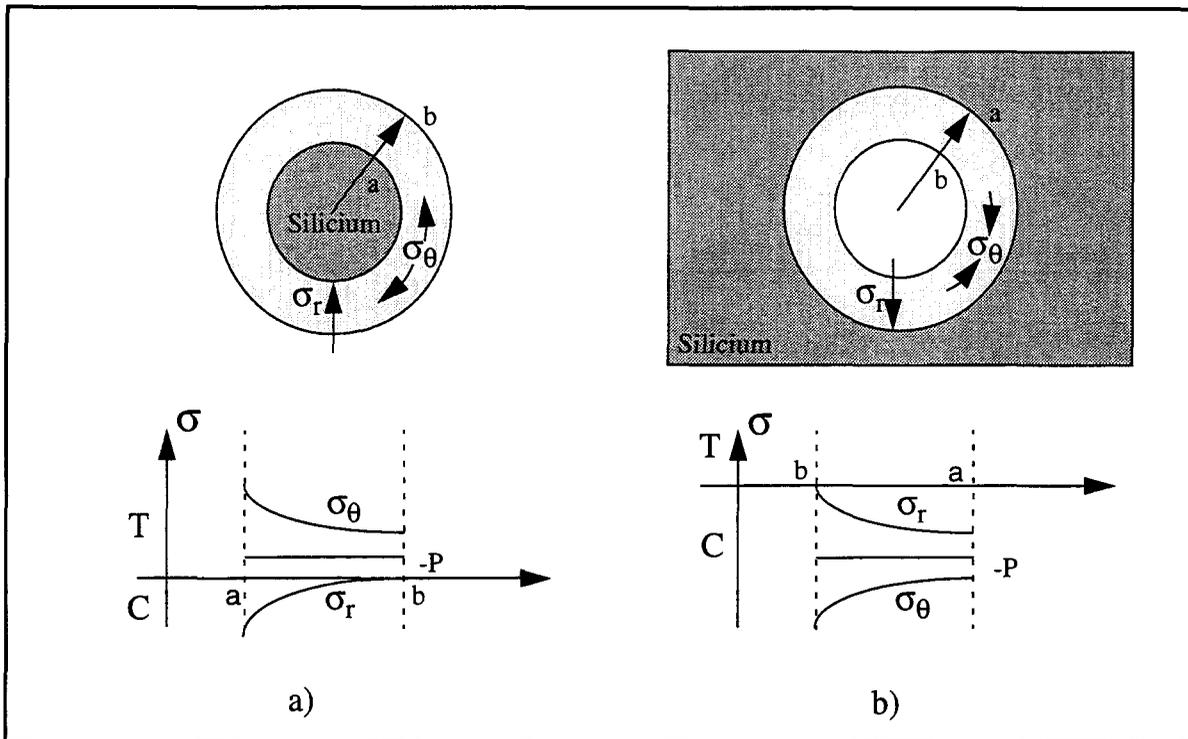


Figure 10 : Définition des états de contraintes de la silice en croissance sur a) un substrat cylindrique, b) un substrat concave. σ_r , σ_θ et P sont respectivement les composantes radiale et tangentielle de la contrainte et P est la pression hydrostatique de la silice.

Or les travaux sur la physique des hautes pressions [34 et 35] ont montré que la diffusivité et la solubilité d'un élément dans un matériau dépendent de l'état de contrainte du matériau. En compression, ces deux grandeurs sont réduites. Par contre, aucune conclusion n'existe lorsqu'il s'agit d'un état de tension. Dans le cas de la diffusion des agents oxydants dans le dioxyde de silicium, il n'a pas encore été possible de différencier les effets de réduction de la diffusivité et/ou de la solubilité sur la réduction d'oxydation. Aussi considère-t-on uniquement la variation de la diffusivité.

Dans un état de compression de la silice, la diffusivité est réduite (équation (51)):

$$D_{\text{ox}}^{\sigma} = D_{\text{ox}} \exp\left(-\frac{PV_D}{KT}\right) \quad \text{pour } P > 0 \quad (51)$$

$$D_{\text{ox}}^{\sigma} = D_{\text{ox}} \quad \text{pour } P < 0 \quad (52)$$

Par contre, supposer une augmentation de la diffusivité dans un état de tension conduit au fait que les épaisseurs d'oxyde que l'on fait croître sur un substrat convexe sont plus importantes que celles que l'on a fait croître dans les mêmes conditions sur un substrat plan [36]. Or ceci n'a jamais été observé. On considère donc que la diffusivité reste inchangée en état de tension (équation (52)). Rafferty a proposé une explication basée sur la variation de la taille des interstices nécessaires à la diffusion.

Pour pouvoir rendre compte de la réduction de la cinétique d'oxydation sur les substrats convexes, il est nécessaire de considérer l'influence des contraintes sur le coefficient de réaction à l'interface. Lorsque la surface du substrat est comprimée par une contrainte normale (cas de substrats convexes et concaves), l'énergie d'activation normalement nécessaire à la réaction (correspondant à la rupture d'une liaison Si-Si) n'est plus suffisante. En effet, l'expansion de volume du nouvel oxyde doit contrebalancer en plus la contrainte normale. Ceci se traduit par une modification de l'énergie d'activation du processus tenant compte de ce travail supplémentaire que doit fournir la silice en expansion :

$$k_{\text{si}}^{\sigma} = k_{\text{si}} \exp\left(\frac{\sigma_{\text{nn}} V_K}{KT}\right) \quad \text{pour } \sigma_{\text{nn}} < 0 \quad (53)$$

$$k_{\text{si}}^{\sigma} = k_{\text{si}} \quad \text{pour } \sigma_{\text{nn}} > 0 \quad (54)$$

Pour une contrainte normale positive, étant donné qu'aucun résultat expérimental n'a pu démontrer d'effets sur k_{si} , la constante de réaction est maintenue constante (équation 54).

Enfin rappelons que les contraintes de cisaillement ont également un effet sur la viscosité des matériaux (§2.2.3 de ce chapitre).

Nous présentons dans le paragraphe suivant les techniques de simulation qui ont été développées afin de résoudre numériquement le problème de l'oxydation du silicium.

3. STRATEGIE NUMERIQUE

La simulation est basée sur la méthode des éléments finis qui possède le grand avantage de pouvoir traiter des géométries quelconques. Cependant, pour obtenir une précision suffisante sur la topologie des structures étudiées, il est nécessaire d'utiliser un pas de maillage très fin. De plus, durant l'oxydation, la consommation de silicium ou de polysilicium, l'expansion de volume causée par le nouvel oxyde et la déformation des matériaux entraînent une modification géométrique importante de la structure qui complique énormément la gestion du maillage. Une technique consiste à conserver le maillage initial et à le déformer pour suivre au mieux la nouvelle géométrie, avec si nécessaire l'ajout de noeuds sur les nouvelles frontières du domaine de simulation [37 et 38]. Cette solution conduit cependant à des maillages contenant beaucoup trop d'éléments, bien souvent distordus qui procurent des temps de calcul prohibitifs et détériorent l'exactitude de la solution. C'est pourquoi, la méthode qui consiste à remailler systématiquement la structure dès que sa géométrie est modifiée a été choisie, au prix du développement de procédures d'interpolation originales des concentrations et contraintes.

Toutes ces considérations indiquent qu'il est préférable d'utiliser des éléments simples afin d'obtenir des temps de calcul raisonnables. Des éléments triangulaires à 3 noeuds ayant des fonctions de forme linéaires (éléments triangulaire P1) sont donc utilisés.

3.1 Le maillage

Dans le simulateur de technologie IMPACT-4 [39], chaque matériau est défini géométriquement par une enveloppe, résultat du calcul de la topologie. Cette

enveloppe est déterminée par une suite de points (“string model”) dont l’espacement est quasi-constant, égal au pas de référence du maillage. A partir de ces points, qui seront également des noeuds du maillage “éléments finis”, la triangulation est réalisée en trois étapes comme l’illustre la figure 11. Figure 11a, une grille régulière de points est superposée à ceux de l’enveloppe. Pour obtenir un maillage régulier, le pas de grille est pris égal à la distance moyenne séparant les points de l’enveloppe. Les points trop proches de l’enveloppe sont éliminés. Afin de minimiser le nombre d’angles obtus, la triangulation est générée avec le critère de Delaunay. Cette opération est réalisée par le mailleur MSHPTS [40] développé à l’INRIA, qui, durant la construction de la triangulation élimine automatiquement les points extérieurs au domaine. Le résultat de la triangulation est donné dans la figure 11b. Enfin, une régularisation de maillage est systématiquement effectuée pour améliorer encore les formes des éléments triangulaires. Les noeuds intérieurs sont déplacés vers la position du barycentre de leurs premiers voisins. Cette procédure est menée de manière itérative jusqu’à l’obtention de la convergence sur l’ensemble des coordonnées (figure 11c).

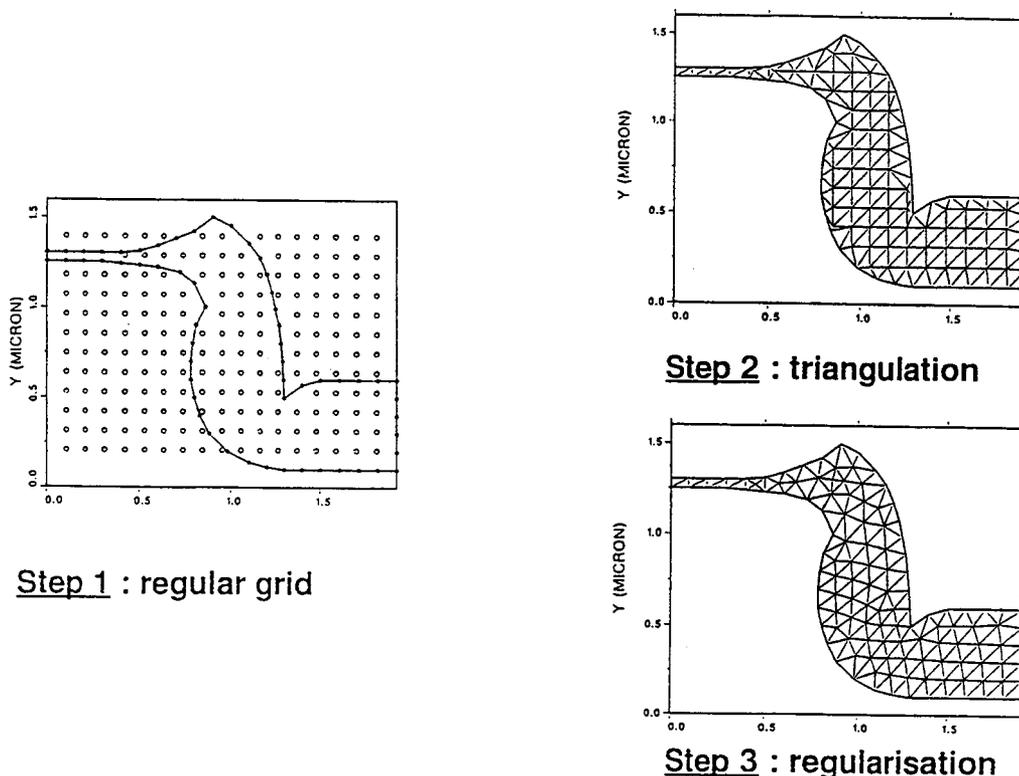


Figure 11 : Etapes systématiques permettant le maillage d’un domaine dans IMPACT-4 : a) une grille de points est superposée aux noeuds définissant l’enveloppe du domaine, b) la triangulation est effectuée avec le critère de Delaunay, c) une procédure itérative de régularisation est appliquée aux coordonnées des noeuds intérieurs au domaine [39].

REMARQUE : 1) Comme les domaines sont traités séparément, les noeuds qui sont situés aux interfaces sont doubles dans la mesure où deux valeurs nodales y sont affectées, une pour chaque domaine. Des noeuds triples ont également été introduits pour reproduire les différents cas topologiques.

2) Un maillage unique est utilisé pour le calcul de la diffusion i) des agents oxydants dans la silice, ii) des impuretés dans l'ensemble des matériaux, iii) des défauts ponctuels dans le silicium et pour le calcul de la déformation des matériaux.

3.2 La résolution numérique

La simulation 2D de l'oxydation nécessite de résoudre :

□ L'équation de Laplace à coefficients non-constant (équation (2)) afin de calculer les concentrations des agents oxydants dans la silice.

□ Les équations d'équilibre mécanique (équations (33) et (34)).

Ces équations différentielles sont discrétisées par la méthode des éléments finis avec, comme cela a été justifié plus haut, des éléments triangulaires P1. L'assemblage "élément fini" est basé sur la technique des résidus pondérés et la méthode de Galerkin [41]. Le système linéaire qui en résulte est résolu par :

□ Une méthode de gradients conjugués avec préconditionnement pour l'équation de Laplace.

□ Une méthode de Gauss directe pour le problème mécanique. Dans ce cas, un algorithme de minimisation de la largeur de bande et du profil du système linéaire a été implanté afin de réduire les temps de calcul [42].

Les non-linéarités apparaissant dans ces équations (relations 31, 51 et 53) sont introduites de manière self-consistante par une procédure itérative permettant la convergence globale du calcul (étape 6 de l'organigramme de la figure 2). Une techni-

que de sous-relaxation met à jour les tableaux des contraintes agissant sur les paramètres non linéaires du problème :

$$\sigma_{nn}^{(k)} = (1 - \omega) \cdot \sigma_{nn}^{(k-1)} + \omega \cdot \sigma_{nn}^{(k)} \quad (55)$$

$$P^{(k)} = (1 - \omega) \cdot P^{(k-1)} + \omega \cdot P^{(k)} \quad (56)$$

$$\sigma_{max}^{(k)} = (1 - \omega) \cdot \sigma_{max}^{(k-1)} + \omega \cdot \sigma_{max}^{(k)} \quad (57)$$

Dans ces expressions, σ_{nn} , P et σ_{max} sont respectivement la contrainte normale à l'interface Si/SiO₂, la pression hydrostatique et la contrainte maximale de cisaillement. ω est le facteur de relaxation commun aux trois contraintes, et k est le compteur de boucles. Le choix du coefficient ω est primordial. En effet, des valeurs importantes ($\omega=0.3$) aboutissent souvent à une divergence du système. Des valeurs très faibles ($\omega=10^{-3}$) permettent d'obtenir une convergence, mais nécessite un nombre d'itérations trop important. C'est pourquoi nous préconisons de modifier dynamiquement les valeurs de ω selon la qualité de la convergence du système. D'une valeur initiale arbitrairement fixée à 0.3 en début de pas de temps, ω évolue empiriquement selon l'expression :

$$\omega = 0.3 \cdot 0.7^j \quad (58)$$

où j est incrémenté lorsque les écarts de contraintes entre boucles augmentent :

$$j = j + 1 \text{ si}$$

$$\Delta\sigma_{nn}^{(k+1)} > \Delta\sigma_{nn}^{(k)} \quad (59)$$

ou

$$\Delta P^{(k+1)} > \Delta P^{(k)} \quad (60)$$

ou

$$\Delta\sigma_{max}^{(k+1)} > \Delta\sigma_{max}^{(k)} \quad (61)$$

avec les écarts de contraintes calculés de la manière suivante :

$$\Delta\sigma_{nn}^{(k)} = \text{Max}_{\text{noeuds}} \left(\sigma_{nn}^{(k)} - \sigma_{nn}^{(k-1)} \right) \quad (62)$$

$$\Delta P^{(k)} = \text{Max}_{\text{elements}} \left(P^{(k)} - P^{(k-1)} \right) \quad (63)$$

$$\Delta\sigma_{\text{max}}^{(k)} = \text{Max}_{\text{elements}} \left(\sigma_{\text{max}}^{(k)} - \sigma_{\text{max}}^{(k-1)} \right) \quad (64)$$

Le système est considéré convergé lorsque les déplacements incrémentaux de l'ensemble des noeuds, d'une itération à l'autre, sont inférieurs à 1% du déplacement maximal. Une fois cette convergence obtenue, les frontières des domaines sont redéfinies conformément au champ de déplacements calculé.

3.3 La régénération de la géométrie

Le remaillage de la structure avec les procédures précédemment décrites s'opère de deux façons suivant la modélisation (complète ou incomplète).

□ Modélisation complète :

La résolution de la diffusion des agents oxydants permet de définir en tout noeud de l'interface oxydée, la quantité de silicium ou polysilicium consommé par la réaction. Ceci permet de définir une nouvelle enveloppe correspondant à cette consommation (figure 12b). Cette couche de silicium est maillée suivant la procédure standard. Les domaines de silicium et/ou polysilicium qui ont été modifiés sont remaillés immédiatement et les concentrations en impuretés et contraintes y sont interpolées. Le problème mécanique est ensuite résolu. Lorsque la convergence globale sur les déplacements est obtenue, les deux domaines d'oxyde (ancien et nouveau) sont réunis par une procédure qui modifie les attributs des noeuds des deux anciennes enveloppes mais n'altère pas leur maillage (figure 12c). Les nouvelles contraintes, résultant du pas courant d'oxydation et des contraintes résiduelles des pas précédents (équations (48) et (49)), sont calculées pour l'ensemble des matériaux.

Les nouvelles coordonnées de l'ensemble des noeuds de la structure sont alors déterminées en fonction du champ de déplacements calculé (figure 12d). Cette étape pose le problème de la reconstruction des surfaces. Cette dernière met en oeuvre des procédures telles que les éliminations de boucles, les suppressions d'angles trop aigus et les régularisations de densité de points de discrétisation. Ces procédures font largement appel aux possibilités de simulation de topologies disponibles dans IMPACT-4, dont les détails numériques sont donnés par B. Baccus dans son manuscrit de thèse [39].

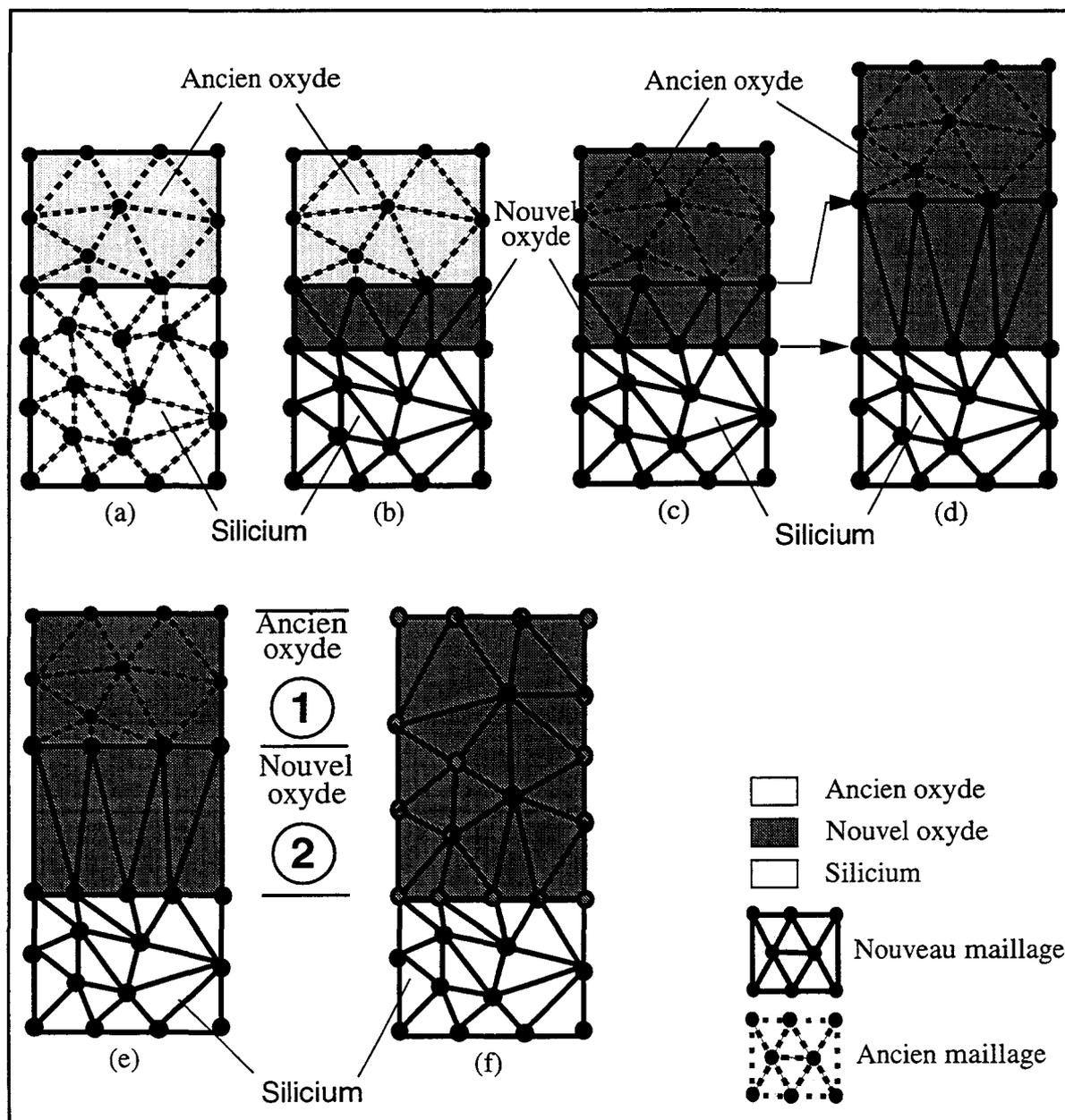


Figure 12 : Régénération du maillage au cours d'une étape d'oxydation : cas du modèle complet.

La dernière étape consiste à remailler le domaine oxyde. Les contraintes dans l'oxyde sont interpolées linéairement sur l'ancien maillage déplacé suivant la procédure illustrée par les figures 12e et f. Les noeuds de l'oxyde de la zone 1 sont interpolés à partir du domaine déplacé de l'ancien oxyde. Les contraintes des noeuds appartenant au nouvel oxyde (zone 2) sont prises égales à celle du point le plus proche appartenant à l'ancien interface.

REMARQUE : Pour les domaines silicium et polysilicium, l'interpolation est immédiate dans la mesure où le nouveau maillage est entièrement contenu dans l'ancien maillage déplacé.

Dans un élément triangulaire P1, les fonctions de forme linéaires sont appliquées aux déplacements, les déformations et les contraintes résultantes y sont donc constantes et bien évidemment discontinues sur l'ensemble de la structure. A l'intérieur d'un pas de temps, les contraintes sphériques $[\sigma^v]$ et de déviation $[\sigma^s]$, générées dans les différents matériaux, sont calculées et gérées par éléments. Il en est de même des contraintes intervenant dans les effets non-linéaires, pression P et contrainte maximale de cisaillement σ_{max} . Par contre, les contraintes normales à l'interface Si/SiO₂, σ_{nn} nécessaires au calcul de la constante de réaction, sont déterminées aux noeuds "interface" par une moyenne sur les éléments connectés à ce noeud. Comme l'évolution de la simulation s'accompagne d'une modification de la géométrie, les contraintes doivent être interpolées sur les maillages successifs. Puisque des interpolations à partir de fonctions discontinues sont préjudiciables à la stabilité numérique, les contraintes sont stockées et interpolées par noeuds durant toute la simulation. Elles sont restaurées par éléments, au début de chaque incrément de temps. Des tests systématiques prouvent que les maillages sont suffisamment denses pour que les passages successifs éléments/noeuds n'altèrent pas la précision numérique.

□ Modélisation incomplète :

La résolution de la diffusion des agents oxydants permet de définir en tout noeud de l'interface oxydée la vitesse d'oxydation et donc le champ de déplacements imposable sur les noeuds de l'ancien oxyde en contact avec les matériaux oxydés. Le problème mécanique est uniquement résolu sur les matériaux nitrure et ancien oxyde. Lorsque la convergence globale est acquise, le nitrure et l'ancien oxyde sont déformés conformément au champ de déplacements calculé (figure 13b). Les coordonnées des noeuds de l'enveloppe du silicium (ou polysilicium) précédemment en contact avec

l'ancien oxyde sont également recalculées (figure 13c). Les domaines oxyde (nouveau et ancien) et silicium (ou polysilicium) sont remaillés (figure 13d). Enfin, les impuretés et contraintes mécaniques sont interpolées avec les même procédures que pour le modèle complet.

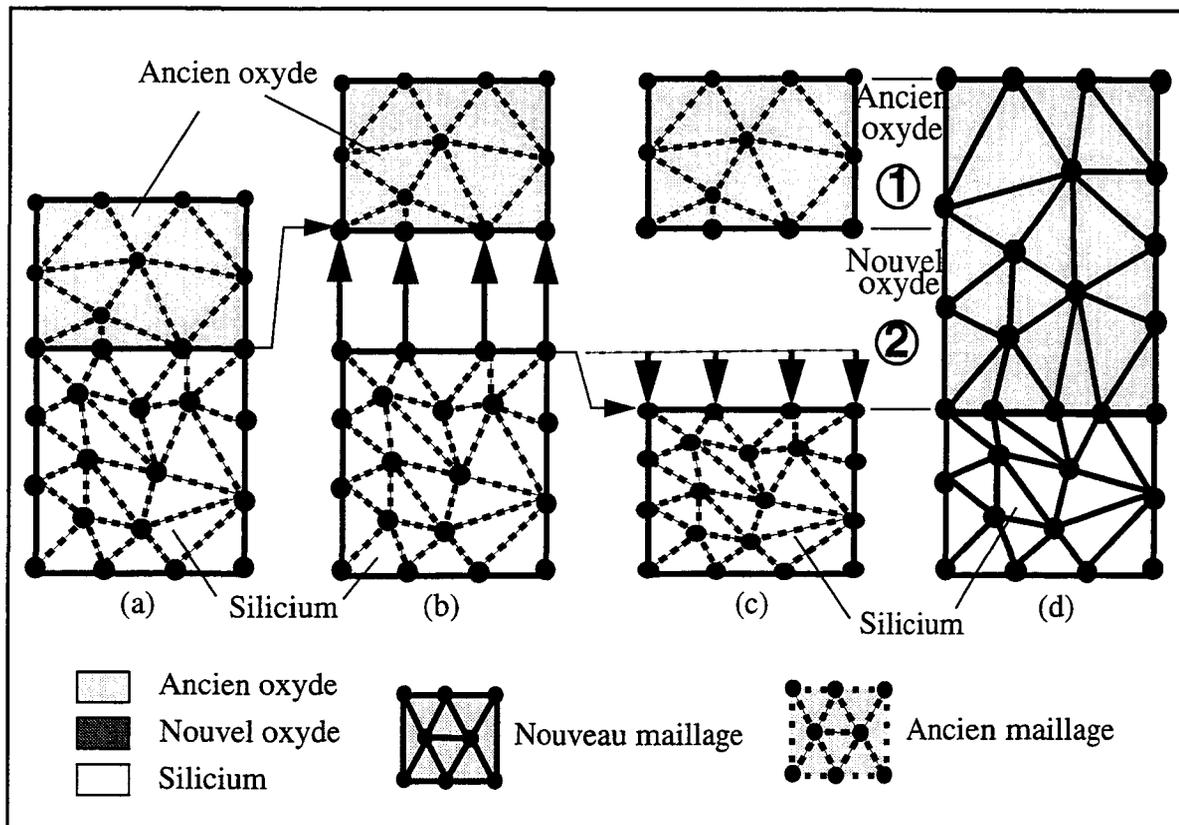


Figure 13 : Regénération du maillage au cours d'une étape d'oxydation : cas du modèle incomplet.

4. VALIDATION DE LA ROBUSTESSE NUMERIQUE DES DEUX MODELES PAR SIMULATION DE DIFFERENTS PROCEDES D'ISOLATION

L'ensemble des algorithmes développés pour ces modèles possède un comportement numérique très stable et permet d'obtenir une convergence rapide même dans les cas où la topologie est complexe. Sept exemples de simulation sont ici présentés afin de l'attester.

L'exemple 1 aborde la simulation d'une structure SWAMI dont la topologie est d'une grande complexité. La simulation d'une structure de type tranchée (exemple 2), à basse température et haute pression, illustre le cas où les contraintes ont un effet important. La simulation d'un LOCOS enterré avec le modèle incomplet (exemple 3) et d'une structure SILO avec le modèle complet (exemple 4) prouvent que l'implémentation numérique permet également d'obtenir une très bonne définition des champs de contraintes. L'exemple 5 constitue une validation globale permettant de coupler le calcul mécanique à la simulation de la diffusion de l'implant d'anti-perçage. L'exemple 6 compare les deux approches (incomplète et complète) présentées dans ce chapitre au travers de la simulation d'une structure LOCOS. Finalement, l'étude d'une structure PBL (exemple 7) révèle la nécessité du modèle complet pour les applications où le matériau oxydé se déforme.

4.1 Exemple 1 : la structure SWAMI [44]

Cette structure possède une complexité topologique très importante puisqu'elle nécessite à la fois la gravure du silicium avec un excellent contrôle de la pente et une double oxydation thermique pour 1) protéger les flancs de la gravure et 2) faire croître l'oxyde de champ.

Procédé : Epaisseur du piédestal : 50 nm.
 Epaisseur du nitrure : 200 nm.
 Profondeur de la gravure : 150 nm.
 Première oxydation : 900°C, 15 minutes.
 Dépot du nitrure de protection des flancs : 30 nm.
 Seconde oxydation : 950°C, 270 minutes.

Le temps CPU nécessaire à cette simulation, réalisée avec le modèle incomplet, est égal à 417 secondes sur station de travail SPARC10. La structure finale possède 1585 noeuds et 2839 éléments dont 1158 dans le silicium, 808 dans l'oxyde et 873 dans le nitrure. Un très bon accord est obtenu avec le résultat expérimental.

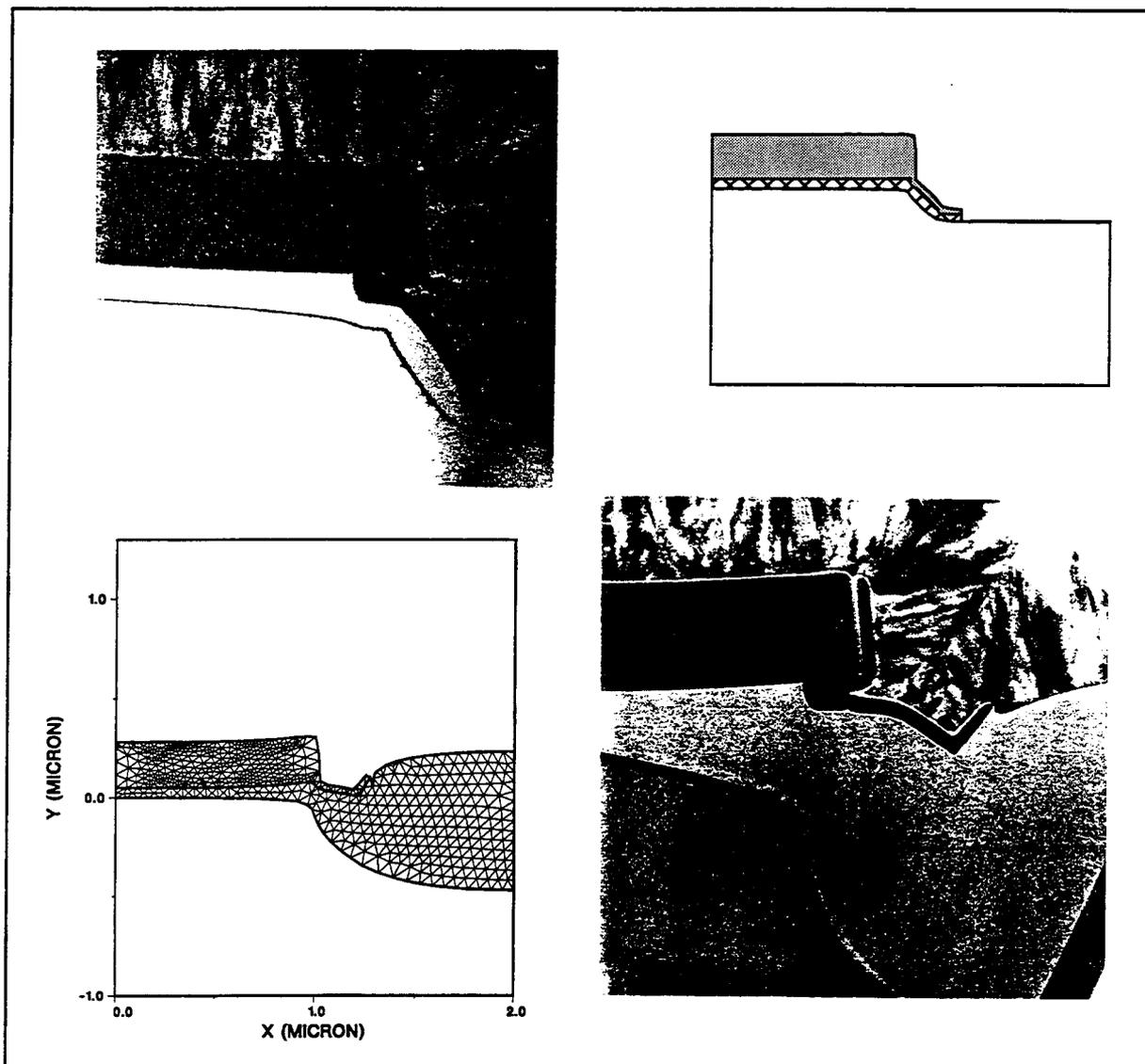


Figure 14 : Comparaison entre la simulation IMPACT-4 et la photographie TEM du procédé d'isolation SWAMI, avant et après oxydation [44].

4.2 Exemple 2 : Oxydation basse température et haute pression

Cette structure test regroupe l'ensemble des facteurs conduisant à un niveau de contraintes élevé et fortement perturbé. En effet, à basse température, l'oxyde se comporte comme un corps élastique et donc génère des contraintes mécaniques importantes. La haute pression augmente la vitesse d'oxydation et induit des déformations du matériau plus importantes. Enfin, la tranchée profonde gravée dans le silicium accentue les déformations de l'oxyde.

Procédé : Profondeur de la gravure : 1 micron.
Température : 800°C.
Pression : 10 atmosphères.

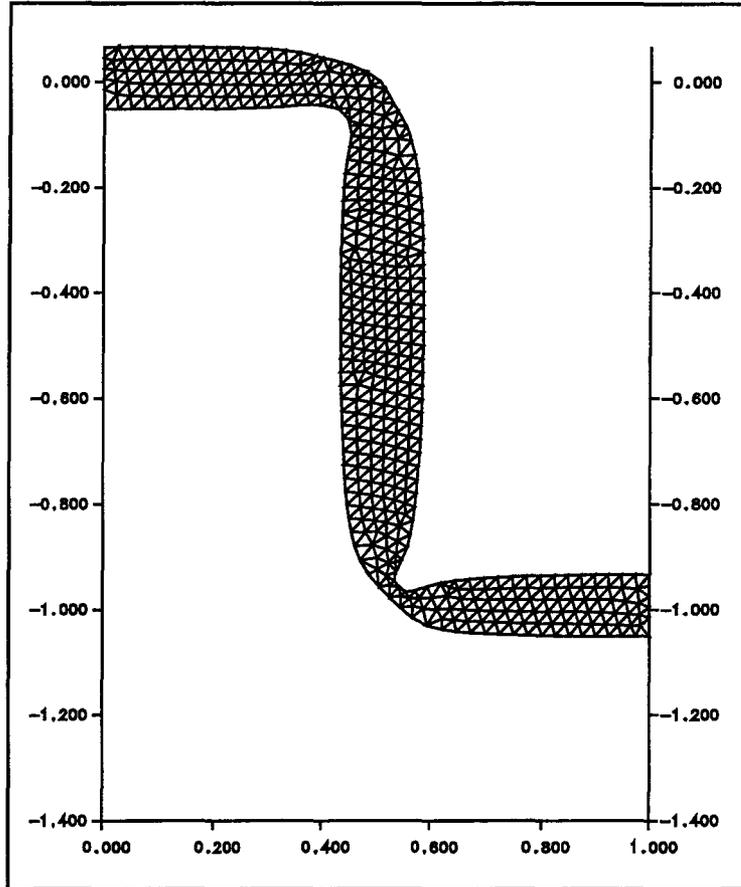


Figure 15 : Simulation d'une oxydation à haute pression (10 atm.) sur un substrat de type tranchée.

Le temps CPU nécessaire à cette simulation, réalisée avec le modèle incomplet, est égal à 90 secondes sur station de travail SPARC 10. La structure finale contient 643 noeuds et 1009 éléments dont 187 dans le silicium et 822 dans l'oxyde.

4.3 Exemple 3 : le LOCOS enterré [45]

La structure LOCOS enterré génère un niveau de contraintes important étant donné le profil non-plan de la structure initiale. Le résultat de la simulation avec le modèle incomplet démontre une très bonne stabilité numérique du profil de la pression

hydrostatique présente dans la silice (figure 16). Un bon accord est obtenu avec le profil expérimental dont une photographie SEM est donnée à la figure 9 du chapitre V.

- Procédé :**
- Epaisseur du piédestal : 20 nm.
 - Epaisseur du nitrure : 120 nm.
 - Profondeur de la gravure : 580 nm.
 - Température : 1000°C.
 - Epaisseur d'oxyde finale : 1.2 micron.

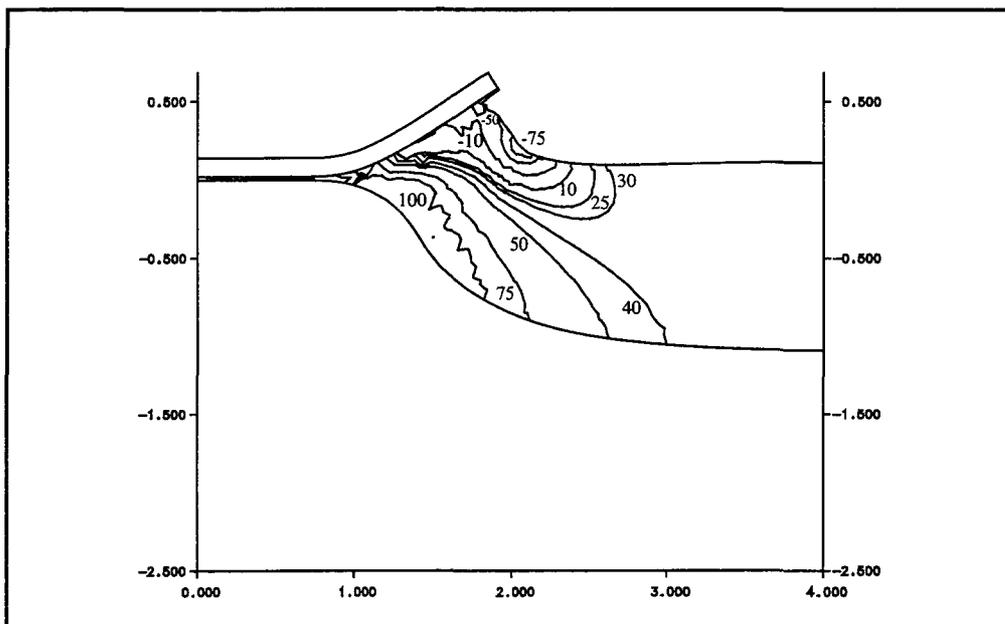


Figure 16 : Structure LOCOS enterrée. Le profil de contraintes correspond à la pression hydrostatique dans l'oxyde (unités en MPa).

4.4 Exemple 4 : Structure SILO [46]

Il s'agit d'un dispositif SILO à deux couches de nitrure. La première (T_{nit1}) est directement scellée sur le substrat par un procédé de nitruration thermique rapide (RTN). Son rôle est de limiter la diffusion des agents oxydants au niveau de l'interface. Son efficacité dépend de la qualité du scellement. Cependant, pour éviter la création de dislocations dans le silicium, il est nécessaire que cette couche reste fine. Par conséquent, pour augmenter la qualité du masquage c'est à dire sa rigidité, on dépose un bicouche oxyde(T_{ox})/nitrure(T_{nit2}) très épais qui s'oppose mécaniquement à la croissance du bec d'oiseau.

Procédé : $T_{\text{nit1}} = 15 \text{ nm.}$
 $T_{\text{ox}} = 40 \text{ nm.}$
 $T_{\text{nit2}} = 40 \text{ nm.}$
Température : 950°C
Temps d'oxydation : 120.5 minutes.

Le résultat de la simulation avec le modèle complet est montré en figure 17 avec la distribution de la pression hydrostatique interne, illustrant ainsi la bonne stabilité du calcul des contraintes. Une étude quantitative de ce dispositif d'isolation est rapportée au chapitre V qui atteste de l'excellente prédiction de cette simulation.

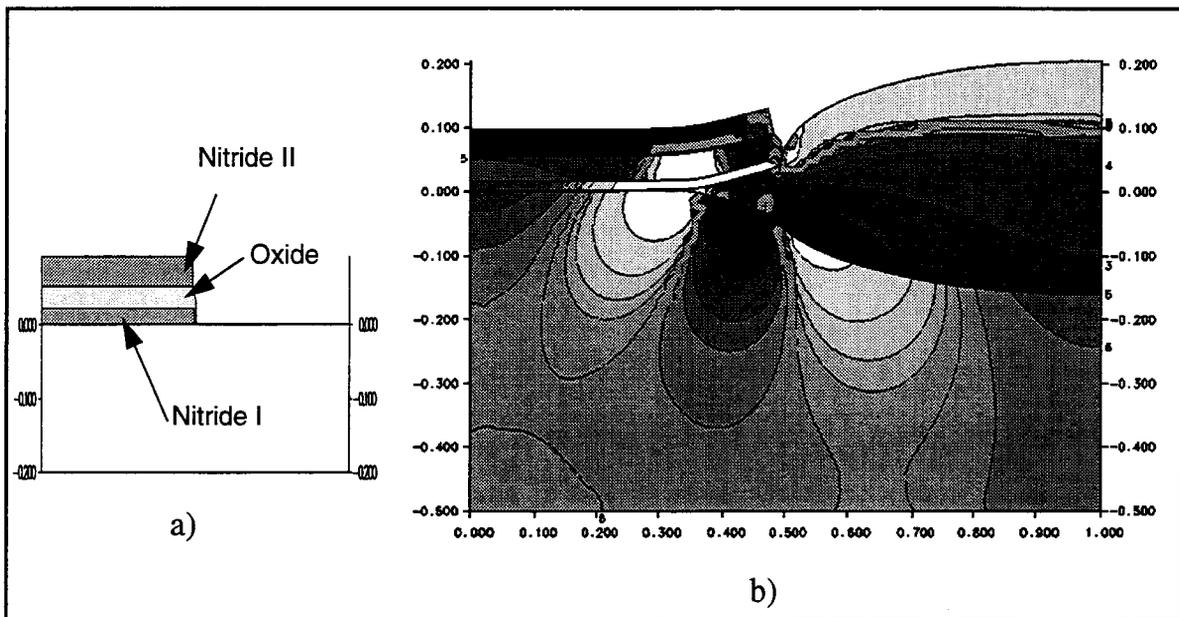


Figure 17 : Simulation d'une structure SILO : a) schématisation de la structure initiale, b) résultat de la simulation, présenté avec le profil de pression. Les zones foncées correspondent au maximum de pression ($\approx +500 \text{ MPa}$) et les zones claires au maximum de tension ($\approx -500 \text{ MPa}$).

4.5 Exemple 5 : Validation globale

La structure d'isolation de type tranchée de la figure 18a, résulte d'une simulation purement élastique dans laquelle l'effet des contraintes est négligé. Cette structure représente un test global vu la complexité du dispositif. La figure 18b correspond à la même structure mais simulée avec le modèle viscoélastique non linéaire. Ce résultat prouve la robustesse des algorithmes et montre clairement des cinétiques

d'oxydation réduites dans les zones de compression, près de l'extrémité du nitrure et sur les flancs verticaux d'oxyde entre le silicium et le polysilicium.

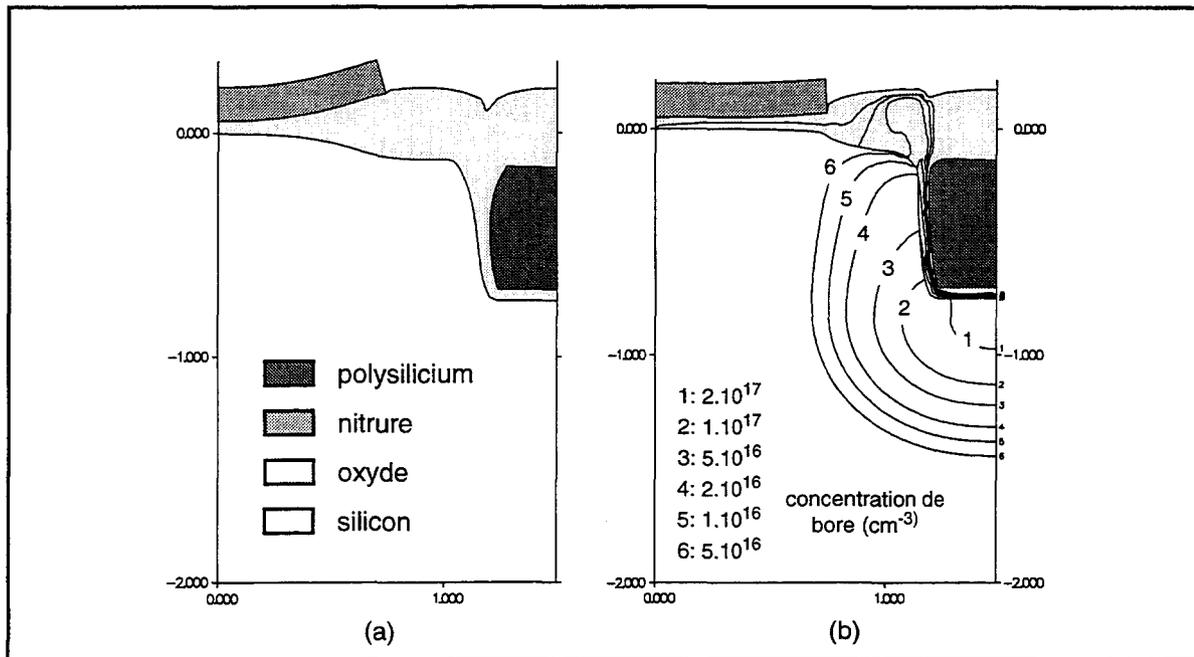


Figure 18 : Simulation de la structure “tranchée” : a) Simulation sans effet des contraintes, b) résultats incluant les effets des contraintes. Le profil de dopage en bore est également indiqué.

4.6 Exemple 5 : comparaison des deux approches

Les deux approches (incomplète et complète) présentées dans ce chapitre doivent aboutir à des résultats similaires en terme de formes d'oxyde pour toutes les structures n'incluant pas de déformations des matériaux oxydés (Si ou Poly). La simulation de la structure LOCOS décrite au chapitre II paragraphe 2.2.3 Exemple 3 a été choisie pour le vérifier.

Procédé : Epaisseur du piédestal : 50 nm.
 Epaisseur du nitrure : 120 nm.
 Température : 1000°C.
 Temps d'oxydation : 170 minutes.

Pour ces deux simulations, le pas de maillage est choisi volontairement très petit pour pouvoir évaluer la sensibilité du résultat au pas de discrétisation. Ainsi

avec un pas égal à 250 angstroems, la structure finale possède les caractéristiques suivantes :

❑ Modèle incomplet (figure 19a)

nombre de noeuds : 1929.

nombre d'éléments : 3453.

temps CPU : 515 secondes sur station de travail SPARC 10.

❑ Modèle complet (figure 19b)

nombre de noeuds : 2622.

nombre d'éléments : 4839.

temps CPU : 13118 secondes sur station de travail SPARC 10.

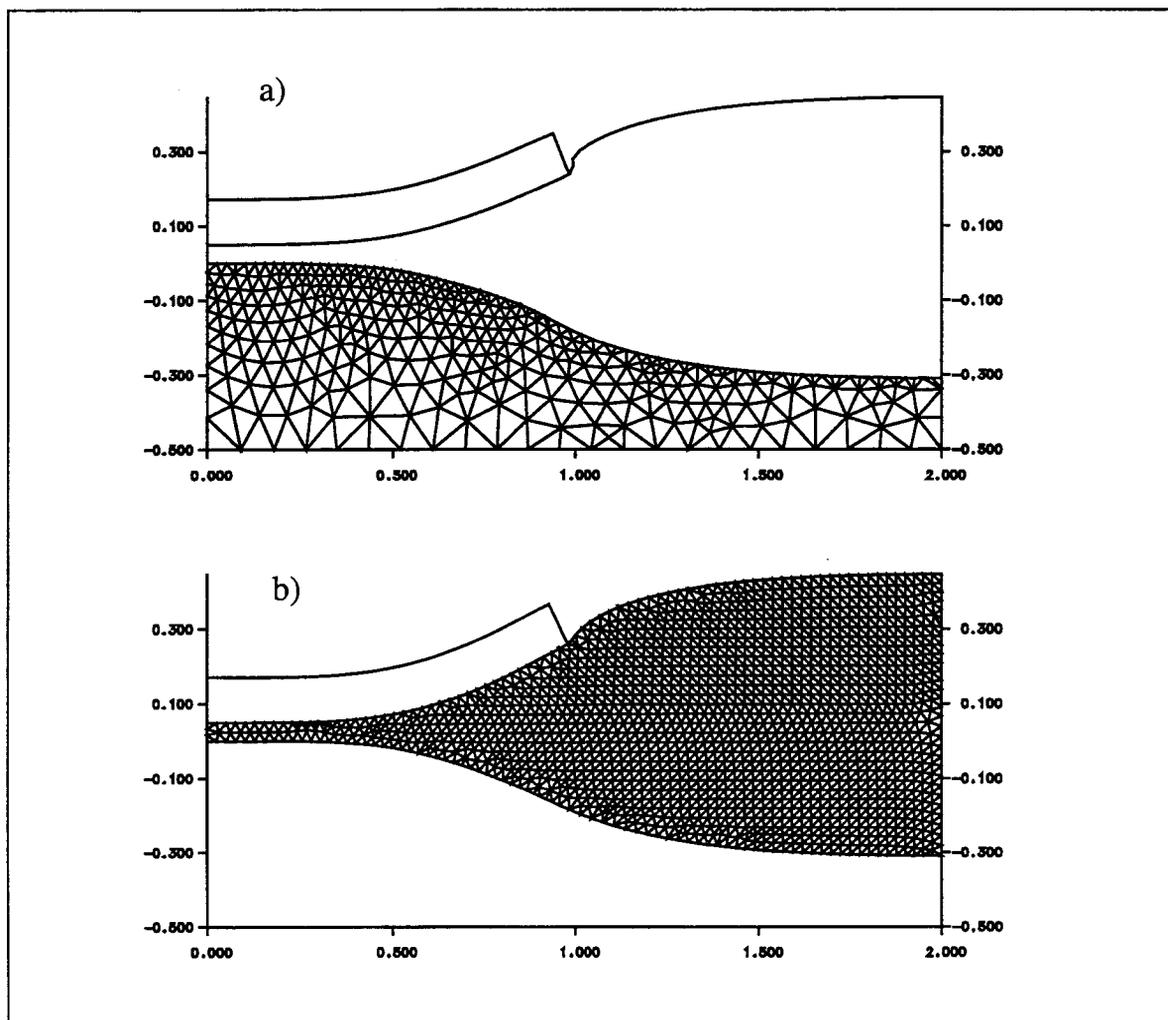


Figure 19 : Comparaison des deux approches implantées dans IMPACT-4 pour la simulation de l'oxydation du silicium : a) résultat avec le modèle incomplet, b) simulation avec le modèle complet.

On constate que les deux formes d'oxyde obtenues après simulation sont quasiment identiques et en très bon accord avec l'expérience (confère figure 17 du chapitre II). Néanmoins, le temps CPU nécessaire à la solution complète est beaucoup trop important. Avec un maillage plus réaliste, diminuant par deux le nombre total de noeuds dans la structure, on obtient des temps de calcul respectivement égaux à 94 et 1182 secondes pour les modèles incomplet et complet. Le résultat correspondant à ce maillage plus lâche, dans le cas du modèle complet, est présenté en figure 20, avec le profil de la pression hydrostatique interne. On s'aperçoit que la forme d'oxyde reste identique.

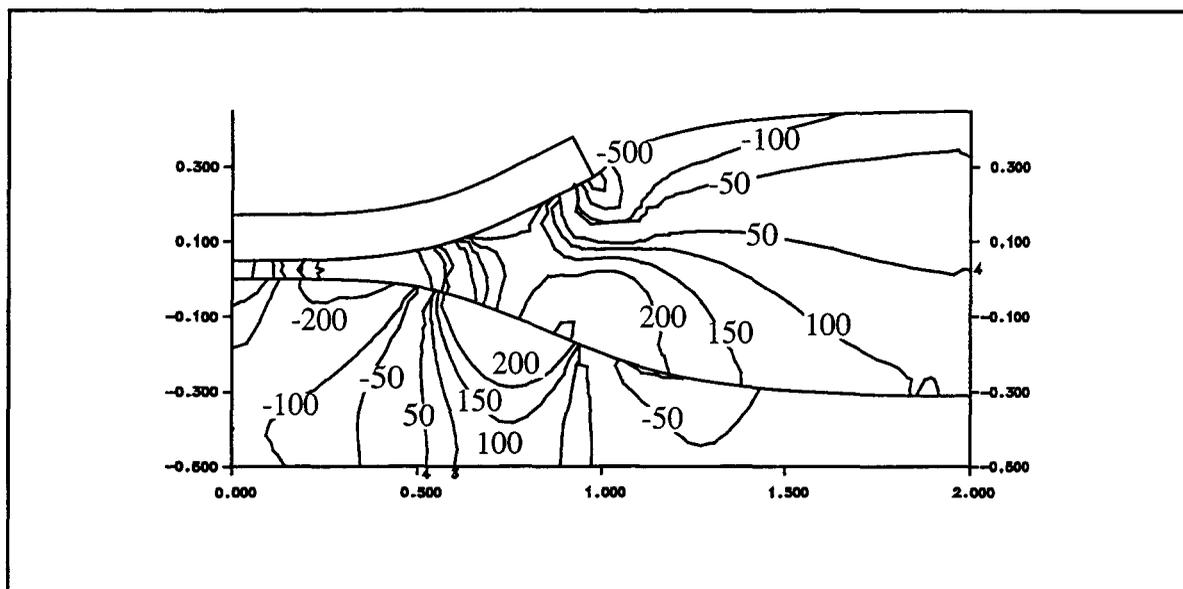


Figure 20 : Structure LOCOS [47]. La simulation a été réalisée avec un pas de maillage double de celui utilisé pour les résultats de la figure 19. Le profil de la pression hydrostatique interne est donné en MPa.

La comparaison des résultats en terme de profil de contraintes (profil de la pression hydrostatique interne) est réalisée à la figure 21 pour le pas de maillage égal à 250 angstroms. On s'aperçoit à nouveau que les deux solutions aboutissent à des résultats très proches. De plus, l'augmentation du pas de maillage (figure 20) n'influe pratiquement pas sur la distribution 2D de la pression.

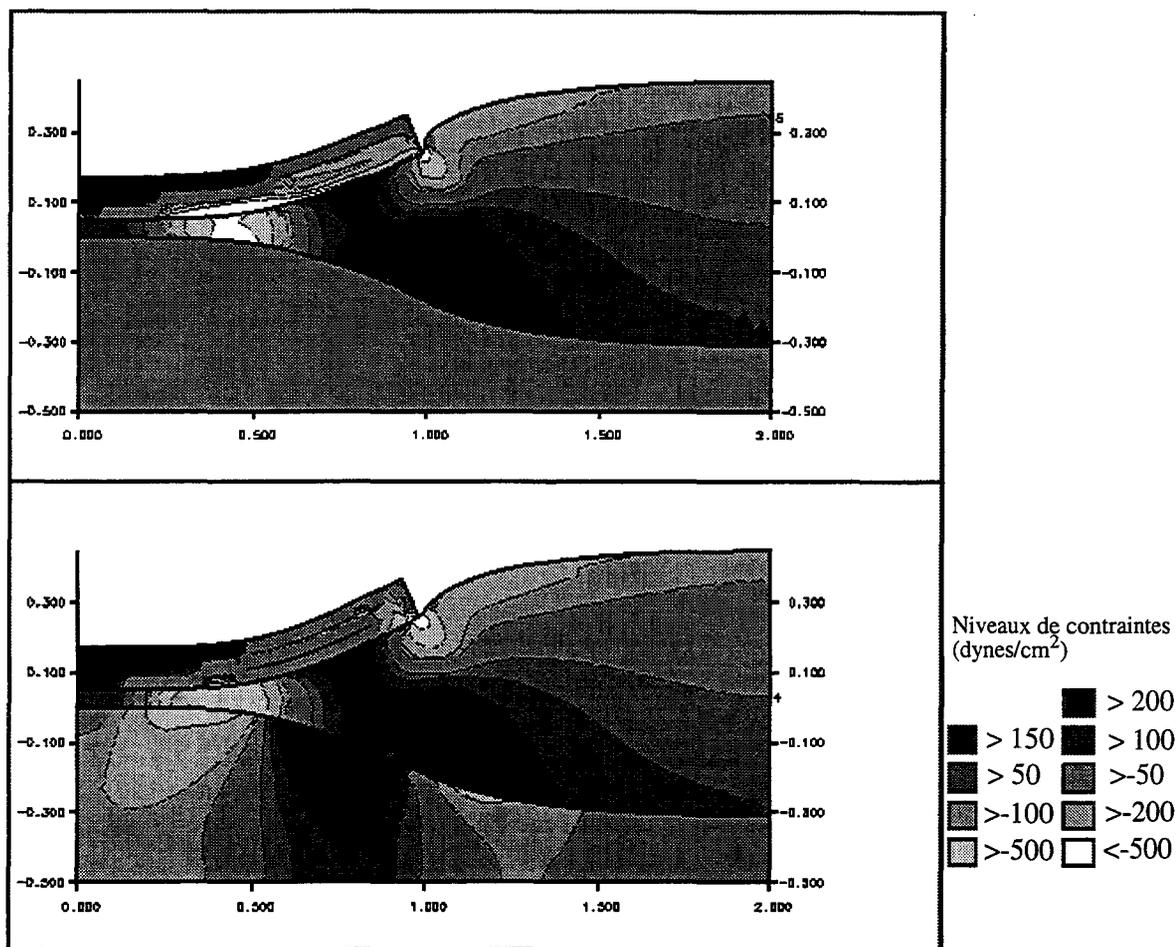


Figure 21 : Distribution bidimensionnelle de la pression hydrostatique interne pour la structure LOCOS décrite en [47].

4.7 Exemple 7 : La structure PBL [48]

Dans le cas de la structure Poly-Buffer LOCOS, la réduction du bec d'oiseau est obtenue par l'épaississement de la couche de nitrure. Cependant, pour éviter la création de dislocations dans le substrat, on introduit entre le nitrure et l'oxyde piédestal une couche de polysilicium qui est chargée d'absorber les contraintes mécaniques induites par la déflexion du nitrure. Or, comme la formation du bec d'oiseau ne peut pas être totalement annihilée, le polysilicium se retrouve déformé au cours de

l'oxydation. C'est ce qu'on observe dans le procédé décrit ci-dessous et dont un profil SEM est présenté à la figure 22.

Procédé : Epaisseur du piédestal : 18 nm.
Epaisseur du tampon de polysilicium : 50 nm.
Epaisseur du nitrure : 250 nm.
Température : 950°C.
Epaisseur d'oxyde finale : 0.7 micron.

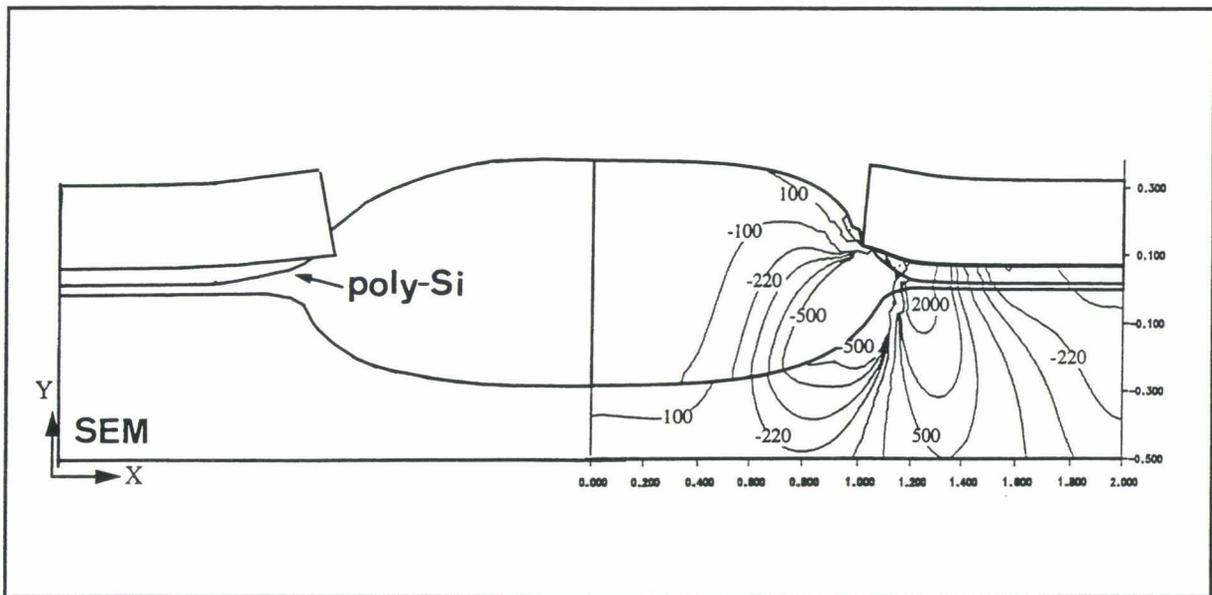


Figure 22 : Structure Poly-Buffer LOCOS [48]. L'épaisseur finale de l'oxyde de champ est égale à 0.7 μm . Le profil des contraintes normales dans la direction Y est donné en MPa. La simulation est effectuée avec le modèle complet (le temps CPU égal à 5245 secondes).

La simulation de cette structure avec le modèle complet permet d'obtenir un excellent accord avec l'expérience (figure 22). L'utilisation du modèle incomplet est à éviter puisqu'il impose une rigidité absolue au polysilicium non vérifiée expérimentalement (figure 23).

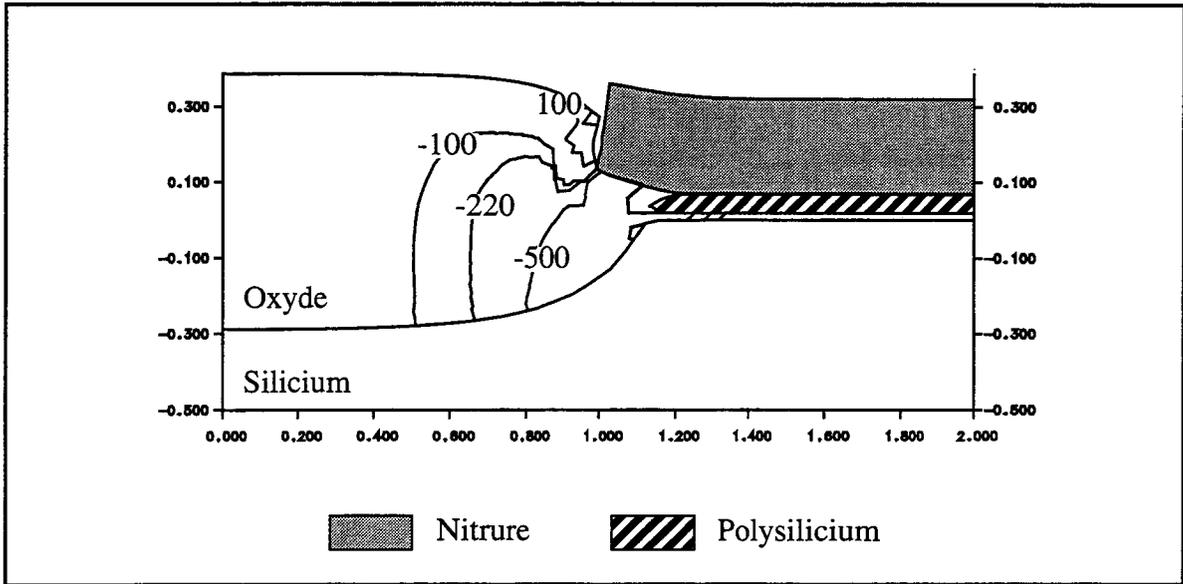


Figure 23 : Structure Poly-Buffer LOCOS. L'épaisseur finale de l'oxyde de champ est égale à $0.7 \mu\text{m}$. Le profil des contraintes normales dans la direction Y est donné en MPa. La simulation est effectuée avec le modèle incomplet [48].

Chapitre 3

Références bibliographiques

- [1] A. Fargeix and G. Ghibaudo, "Dry Oxidation of Silicon: a New Model of Growth Including Relaxation of Stress By Viscous Flow", *Journal of Applied Physics*, vol. 54, no. 12, December 1983.
- [2] S. M. Hu, "Stress Related Problems in Silicon Technology", *Journal of Applied Physics*, vol. 70, no. 6, p. 53, September 1991.
- [3] P. Murray and G. F. Carey, "Determination of Interfacial Stress During Thermal Oxidation of Silicon", *Journal of Applied Physics*, vol. 65, no. 9, p. 3667, May 1989.
- [4] E. P. Eernisse, "Stress in Thermal SiO₂ during Growth", *Applied Physics Letters*, vol. 35, no. 1, p. 8, July 1979.
- [5] E. Kobeda and E. A. Irene, *Journal of Vacuum Science and Technology B*, vol. 5, p. 15, 1987.
- [6] E. Kobeda and E. A. Irene, *Journal of Vacuum Science and Technology B*, vol. 6, p. 574, 1988.
- [7] C. H. Hsueh and A. G. Evans, "Oxidation Induced Stresses and Some Effects on the Behavior of Oxide Films", *Journal of Applied Physics*, vol. 54, no. 11, p. 6672, November 1983.
- [8] N.F. Mott, *Proc. R. Soc. London*, vol. 376, p. 207, 1981.

- [9] S. M. Hu, Journal of Applied Physics, vol. 45, p. 1567, 1974.
- [10] V. Senez, "Simulation Numérique de l'Oxydation du Silicium : extraction des paramètres", Mémoire de D.E.A. d'électronique présenté à l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres-Artois, juillet 1992.
- [11] C. T. Wang "Applied Elasticity" McGraw-Hill, New-York, 1953.
- [12] J. Lemaitre et J. L. Chaboche, "Mécanique des Matériaux Solides", Eds. Dunod, p. 183, 1985.
- [13] S. Timoshenko et J. N. Goodier, "Théorie de l'Elasticité", Eds. Librairie Polytechnique Béranger, p. 17, 1961.
- [14] V. Senez, D. Collard, B. Baccus, M. Brault and J. Lebaillly, "Analysis and Application of a Viscoelastic Model for Silicon Oxidation", Journal of Applied Physics, vol. 76, no. 6, p. 3285, 1994.
- [15] R.M. Christensen, "Theory of Viscoelasticity: an Introduction", Academic Press, New-York, 1982.
- [16] E.P. Eernisse, "Viscous Flow of Thermal SiO₂", Applied Physics Letters, vol. 30, p. 290, 1977.
- [17] C.S. Rafferty, L.M. Landsberger, R.W. Dutton and W.A. Tiller, "Non-Linear Viscoelastic Dilatation of SiO₂ Films", Applied Physics Letters, vol. 54, p. 151, 1989.
- [18] J.C. Maxwell, "On the Dynamical Theory of Gases", Philosophical Magazine, vol. 35, p. 129, 1867.
- [19] G. Heterington et al., "The Viscosity of Vitreous Silica", Physics and Chemistry of Glasses, vol. 5, p. 130, 1964.
- [20] S. R. Stiffler, "Oxidation-Induced Substrate Strain in Advanced Silicon Integrated-Circuit Fabrication", Journal of Applied Physics, vol. 68, p. 351, 1990.
- [21] S. M. Hu, "Effects of Process Parameters on Stress Development in Two-Dimensional Oxidation", Journal of Applied Physics, vol. 64, p. 323, 1988.
- [22] K. Imai and Y. Yamabe, "Nonplanar Oxidation in Dry O₂/NF₃", Applied Physics Letters, vol. 56, p. 280, 1990.
- [23] D. Kouvatso, T. G. Huang and R. J. Jaccodine, "Fluorine-Enhanced Oxidation of Silicon", Journal of the Electrochemical Society, vol. 138, p. 1752, 1991.

- [24] J. H. Li and D. R. Uhlmann, "The Flow of Glass at High Stress Levels", *J. Non-Cryst. Solids*, vol. 3, p. 127, 1970.
- [25] P. P. Donnadieu, O. Jaoul and M. Kléman, "Plasticité de la Silice Amorphe de part et d'autre de la Transition Vitreuse", *Philosophical Magazine A*, vol. 52, p. 5, 1985.
- [26] B. Persoz, "Introduction à l'étude de la Rhéologie", Dunod, Paris, 1960.
- [27] H. Eyring, "Viscosity, Plasticity and Diffusion as Examples of Absolute Reaction Rates", *Journal of Chemical Physics*, vol. 4, p. 283, 1936.
- [28] J. Lemaitre et J. L. Chaboche, "Mécanique des Matériaux Solides", Eds. Dunod, p. 109, 1985.
- [29] T. Uchida, N. Kotani, K. Kobayashi, Y. Mashiko and N. Tsubouchi, "A Simulation of Plastic Deformation of Silicon During Thermal Oxidation", *Proceedings of the IEDM'93*, p. 315, 1993.
- [30] J. R. Patel and A. R. Chaudri, "Macroscopic Plastic Properties of Dislocation-Free Germanium And Other Semiconductor Crystals. I. Yield Behavior", *Journal of Applied Physics*, vol. 34, p. 2788, September 1963.
- [31] "Properties of Silicon", INSPEC, p. 477, London 1988.
- [32] J. P. Peng and G. R. Srinivasan, "Non-Linear Visco-Elastic Modeling of Thermal Oxidation of SiO₂", *Nascode VII Tech. Dig*, Eds. J. J. H. Miller, Front Range Press, Boulder, Co., USA, 1991.
- [33] D. B. Kao, J. P. McVittie, W. D. Nix and K. C. Saraswat, "Two-Dimensional Thermal Oxidation of Silicon-I Experiments", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. ED-34, no. 5, p. 1008, May 1987.
- [34] W. Paul and D. M. Warschauer, Eds *Solid under Pressure*, New-York: McGraw-Hill, 1963.
- [35] P. W. Bridgman, "The Physics of High Pressure", London: G. Bell and Sons Ltd, 1949.
- [36] C. S. Rafferty, "Simulation of Stress-Dependent Oxidation", *Proceedings of the 2nd International Symposium on Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology*, G. R. Srinivasan, J. D. Plummer and S. T. Pantelides, Eds. The Electrochemical Society, Pennington, NJ, p. 756, 1991.
- [37] L. Borucki, H. H. Hansen and K. Varahramian, "FEDSS - A 2D Semiconductor Fabrication Process Simulator", *IBM J. Res. Develop.*, vol. 29, p. 263, May 1985.
- [38] M. E. Law, C. S. Rafferty and R. W. Dutton, "SUPREM-IV User's Manual", Stanford University, Stanford, 1986.

- [39] B. Baccus, "Simulation Bidimensionnelle de Technologies Silicium - L'approche multicouches", Thèse présentée à l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres-Artois, n° d'ordre 150, Mars 1990.
- [40] F. Hecht and A. Marocco, "Internal Report on MSHPTS", INRIA, Rocquencourt, France, February 1986.
- [41] O.C. Zienkiewicz, "The Finite Element Method in Engineering Science", Mc Graw-Hill, 1971.
- [42] S.W. Sloan, "A Fortran Program for Profile and Wavefront Reduction", International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 28, p. 2651, 1989.
- [43] Dominique Collard, "Contribution à la simulation de technologies et de dispositifs Silicium", Mémoire d'habilitation à diriger des recherches, présenté à l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres-Artois, Décembre 1994.
- [44] K. Y. Chiu, R. Fang, J. Lin, J. L. Moll, C. Lage, S. Angelos and R. Tillman, International Electron Devices Meeting, 1982.
- [45] M. Brault, Private Communication, Philips Components, Caen, April 1992.
- [46] P. Molle, S. Deleonibus and F. Martin, "Sealed Interface Local Oxidation by rapid Thermal Nitridation", Journal of the Electrochemical Society, vol. 138, no. 12, p. 3732, December 1991.
- [47] H. Umimoto, S. Odanaka, I. Nakao and H. Esaki, "Numerical Modeling of Nonplanar Oxidation Coupled with Stress Effects", IEEE Transactions on Computer-Aided Design, vol. 8, no. 6, p. 599, June 1989.
- [48] I. De Wolf, J. Vanhellefont, A. Romano-Rodriguez, H. Norström and H. E. Maes, "Micro-Raman Study of Stress Distribution in Local Isolation Structures and Correlation with Transmission Electron Microscopy", Journal of Applied Physics, vol. 71, no. 2, 15 January 1992.

Chapitre 4

analyse des contraintes

Les topologies complexes des composants intégrés et la grande diversité des matériaux utilisés dans leur fabrication entraînent la formation de contraintes mécaniques importantes dans les dispositifs silicium. Les origines de ces contraintes sont rappelées et les conséquences néfastes qu'elles produisent sont précisées. L'analyse se focalise ensuite sur les contraintes générées par l'oxydation. En particulier, l'influence des conditions d'oxydation sur le niveau de contraintes dans l'oxyde est examinée au travers de la simulation d'une structure LOCOS. La procédure de calibration des paramètres rhéologiques et des volumes d'activation des effets des contraintes sur la cinétique est détaillée. Ceci permet finalement d'analyser les différences qui existent entre les modèles de comportements rhéologiques viscoélastiques non-linéaires et visqueux non-linéaires, et de conclure sur leur domaine de validité.

1. ORIGINES ET EFFETS DES CONTRAINTES MECANIQUES

Le développement de contraintes mécaniques lors de la fabrication des circuits intégrés possède différentes origines que nous détaillons dans ce paragraphe.

□ Les gradients de températures d'un point à l'autre de la tranche de silicium

La montée en température d'un matériau unique, homogène et isotrope, puis son retour à la température initiale, génère de faibles contraintes mécaniques résiduelles si le matériau subit des déformations permanentes de type plastique. Par contre, si d'un point à l'autre du matériau, la montée ou la descente en température ne s'effectuent pas dans le même intervalle de temps, alors des contraintes mécaniques importantes apparaissent, résultat du gradient de déformation. C'est ce qui se produit lors de l'introduction ou de la sortie du four des tranches de silicium de grand diamètre, pour lesquelles l'évolution de la température est beaucoup plus lente au centre que sur le pourtour.

□ Le dépôt de couches fines

Les matériaux que l'on dépose possèdent un niveau de contraintes interne ayant deux origines : premièrement, le processus de dépôt (sputtering, évaporation, chemical vapor deposition ou ion beam deposition [1]) génère une contrainte intrinsèque résultat du positionnement désordonné des atomes les uns par rapport aux autres. Deuxièmement, les montées et descentes en température qui précèdent et suivent l'étape de déposition créent des contraintes mécaniques supplémentaires, conséquences de la différence des coefficients de dilatation thermique entre le matériau déposé et la couche sous-jacente. Lorsqu'il s'agit d'un dépôt uniforme, les contraintes présentes dans le substrat sont peu susceptibles de créer des défauts cristallins étant donné leur faible amplitude. Si, par contre, une discontinuité existe à la surface du film (ex : ouverture d'un masque d'oxydation), l'état de contrainte du film déposé donne naissance à une force parallèle à l'interface des deux matériaux, localisée au bord du matériau, et susceptible de générer des dislocations dans le substrat sous-jacent [2].

A titre d'illustration, la formation de la grille et du spacer d'un transistor MOS a été simulée en supposant un comportement purement élastique de l'ensemble des matériaux (figure 1) [3]. Seules les contraintes issues de la différence des coefficients de dilatation thermique ont été calculées. L'oxyde de grille est déposé à 950°C avec une épaisseur de 50 nm, la grille en polysilicium et le spacer d'oxyde sont respectivement déposés à 750°C et 710°C. Leurs épaisseurs respectives sont égales à 360 et 500 nm. Les étapes de gravures sont effectuées à température ambiante. Le profil de la pression hydrostatique est donné à la figure 1 après la dernière étape de fabrication. Il permet de localiser les faiblesses de la structure (qui correspondent aux maximum de contraintes) et d'optimiser la configuration géométrique afin de réduire les risques de

dislocations dans le silicium. Ce type de calcul permet de conserver un historique des contraintes générées par les cycles thermiques au cours de la fabrication d'un dispositif.

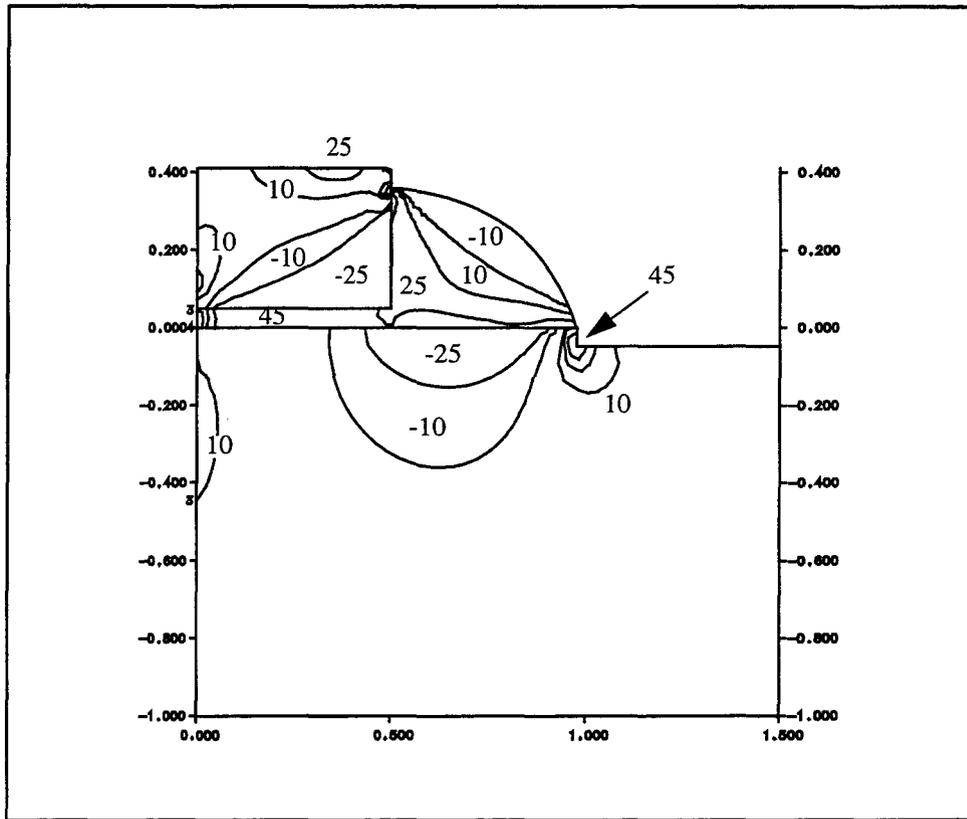


Figure 1 : Formation de la grille et du “spacer” d’un transistor MOS de type LDD. Le profil de pression est donné en MPa et correspond aux déformations élastiques subies par les matériaux lors des cycles thermiques.

□ L’inclusion de matériaux

L’inclusion d’un matériau dans un autre (ex : remplissage de tranchée par du polysilicium, ligne de métal recouverte par un oxyde), génère dans le matériau entourant l’insertion un champ de contraintes complexe. Les contraintes intrinsèques du corps incluí et la différence des coefficients de dilatation thermique sont à l’origine de ce problème [4].

□ Le dopage du silicium et la croissance épitaxiale de matériaux hétérogènes

Le dopage d'un matériau cristallin ou la croissance épitaxiale hétérogène génèrent un désaccord de maille du réseau cristallin qui est à l'origine de contraintes mécaniques.

□ La croissance thermique des matériaux

Lors de la croissance thermique d'un matériau (oxyde de silicium ou siliciure), la génération de contraintes dans le silicium a deux origines. La première correspond à l'augmentation de volume qui accompagne la création du produit de réaction. En effet, si cette augmentation en volume ne peut se réaliser librement, (comme c'est le cas dans la région du bec d'oiseau des structures LOCOS), alors le matériau en croissance exerce des forces mécaniques sur l'ensemble des couches qui l'entourent et cette sollicitation contribue à augmenter le niveau de contrainte de la structure. En second lieu, même si cette croissance s'effectue librement, l'oxyde peut-être perpétuellement déformé si la surface oxydée est non plane (il est distendu sur des surfaces convexes et comprimé sur des surfaces concaves).

L'étude qui est rapportée dans la section suivante s'intéresse aux contraintes issues de la croissance thermique des matériaux. Cependant, nous allons auparavant rappeler les effets négatifs que possèdent les contraintes mécaniques dans la technologie des circuits intégrés.

A partir d'un certain niveau de contraintes, un substrat de silicium se détériore et subit des dislocations cristallines qui sont à l'origine des dysfonctionnements électriques des composants. Le seuil à partir duquel ces défauts du réseau cristallin apparaissent dépend de nombreux facteurs dont la teneur en oxygène et l'historique des cycles thermiques [5, 6 et 7]. On a l'habitude de considérer que pour un niveau supérieur à 1 MPa, des dislocations sont susceptibles d'apparaître [8]. L'apparition de ces dislocations s'effectue par un processus de nucléation favorisé par les procédés d'implantation ionique et d'oxydation thermique. L'oxydation favorise le déplacement des atomes du silicium déformé [9 et 10]. L'implantation ionique provoque des ruptures du réseau cristallin et la création de défauts ponctuels, qui sont à l'origine de l'apparition de dislocations. Une fois créées, ces dislocations peuvent s'accroître et se déplacer par glissement le long de certains plans cristallins. Ce déplacement est favorisé par la

présence de contraintes de cisaillement importantes le long des plans cristallins les plus fragiles [11].

En résumé, à chaque étape de fabrication d'un circuit intégré, la création de contraintes mécaniques est susceptible de générer des dislocations dans le substrat de silicium. La modélisation de ces contraintes doit permettre :

- de mieux comprendre les mécanismes physiques qui en sont la cause.
- d'optimiser les procédés de fabrication dans le but de minimiser leur amplitude.

C'est à ces deux objectifs que répond l'analyse présentée dans ce chapitre.

2. PARAMETRES DE L'OXYDATION INFLUENCANT LE NIVEAU DES CONTRAINTES

Comme nous l'avons rappelé, les contraintes générées lors de l'oxydation du silicium ont deux origines :

- Le manque de volume nécessaire à l'expansion du nouvel oxyde.
- La distension de l'oxyde sur les surfaces convexes et sa compression sur les surfaces concaves au fur et à mesure de l'avancement de la réaction.

Le niveau de ces contraintes va dépendre :

- De l'amplitude des forces s'opposant à l'augmentation volumique.
- Du comportement mécanique qu'adopte l'oxyde pour se déformer.

Afin d'examiner les paramètres influençant ce niveau de contraintes, la simulation d'une structure LOCOS est proposée. Son procédé est le suivant :

- dépôt d'un pad d'oxyde de 50 nm,
- dépôt de la couche de nitrure 120 nm,
- gravure du nitrure,
- oxydation humide durant 170 minutes à 1000°C à une atmosphère.

Les conditions de la simulation sont les suivantes :

- Le silicium est modélisé comme un corps infiniment rigide.
- L'oxyde et le nitrure sont considérés comme des matériaux viscoélastiques non-linéaires, dont les viscosités sont respectivement égales à η_O et η_N . Leur seuil de plasticité respectif dépend des volumes d'activation V_{PO} et V_{PN} . Ces paramètres ont une influence directe sur la relaxation des contraintes au cours du temps, qui sera d'autant plus rapide que les viscosités seront faibles et/ou que les volumes d'activation du régime plastique seront élevés.
- Les effets des contraintes sur la diffusivité des agents oxydants et sur le coefficient de réaction à l'interface sont pris en compte. La diffusivité dépend de la pression interne de la silice et du volume d'activation correspondant, V_D . Plus ces grandeurs sont importantes, plus la diffusivité est réduite. Le coefficient de réaction à l'interface, k_{Si} , est fonction de la contrainte normale à l'interface Si/SiO₂ et du volume d'activation V_K . Sa valeur est d'autant plus faible que les contraintes normales en compression et le paramètre V_K sont grands.

A partir d'une simulation de référence (§ 2.1), utilisant les paramètres calibrés, une étude en variation des coefficients du modèle permet de comprendre l'influence des conditions d'oxydation sur la forme et le niveau de contraintes de l'oxyde. Ces variations étudient successivement les effets de 1) la diffusivité des oxydants et du coefficient de réaction (§ 2.2), 2) la vitesse d'oxydation (§), 3) la rigidité du masque d'oxydation (§ 2.4) et 4) le comportement mécanique de l'oxyde (§ 2.5) sur la réaction d'oxydation.

2.1 Simulation de référence

Les résultats de la simulation de référence avec les paramètres calibrés du modèle sont donnés en figure 2 pour (a) la forme de l'oxyde, (b) le profil de la pression hydrostatique dans la silice. Ce profil donne la valeur de la pression dans le plan de coupe $x=1.5 \mu\text{m}$, où la contribution des différents effets est la plus remarquable. On constate que l'oxyde le plus récemment créé (proche de l'interface Si/SiO₂) est en compression alors que celui proche de la surface est en tension.

| Viscosité de l'oxyde (η_O) | Coefficient de plasticité de l'oxyde (V_{PO}) | Coefficient de réduction de la diffusivité (V_D) | Coefficient de réduction du taux de réaction (V_K) | Coefficient parabolique du modèle de Deal et Grove | Viscosité du nitrure (η_N) |
|-----------------------------------|---|--|--|--|-----------------------------------|
| $2 \cdot 10^{14}$ Poises | 425 A^3 | 75 A^3 | 15 A^3 | $0.343 (\mu\text{m}^2/\text{h})$ | $5 \cdot 10^{15}$ Poises |

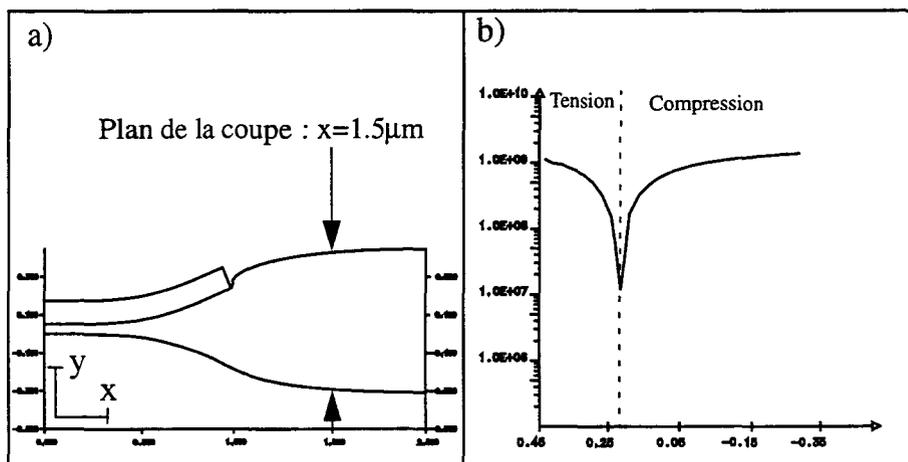


Figure 2 : Simulation du procédé LOCOS : a) forme d'oxyde, b) profil 1D de la pression en $x=1.5 \mu\text{m}$.

2.2 Effets de la diffusivité des oxydants et du coefficient de réaction

La diffusivité des agents oxydants dépend de la pression dans l'oxyde. Négliger cet effet revient à considérer que le volume d'activation correspondant, V_D , est nul. Les figures 4(a) et 4(b) donnent le résultat d'une simulation pour laquelle $V_D=0$. Par comparaison avec la figure 2, on s'aperçoit que l'extension du bec d'oiseau est devenue beaucoup plus importante et que le nitrure n'a plus d'influence sur l'écoulement de l'oxyde (absence de pincement). Ceci traduit le fait que, sous le masque, une plus grande quantité d'agents oxydants atteint l'interface Si/SiO₂, augmentant ainsi le volume et le flux d'oxyde en croissance. D'autre part, le maintien à une valeur constante de la diffusivité ($V_D=0$) permet également de diminuer le niveau des contraintes au voisinage de l'interface.

| Viscosité de l'oxyde (η_O) | Coefficient de plasticité de l'oxyde (V_{PO}) | Coefficient de réduction de la diffusivité (V_D) | Coefficient de réduction du taux de réaction (V_K) | Coefficient parabolique du modèle de Deal et Grove | Viscosité du nitrure (η_N) |
|-----------------------------------|---|--|--|--|-----------------------------------|
| $2 \cdot 10^{14}$ Poises | 425 A^3 | 0 A^3 | 15 A^3 | $0.343 (\mu\text{m}^2/\text{h})$ | $5 \cdot 10^{15}$ Poises |

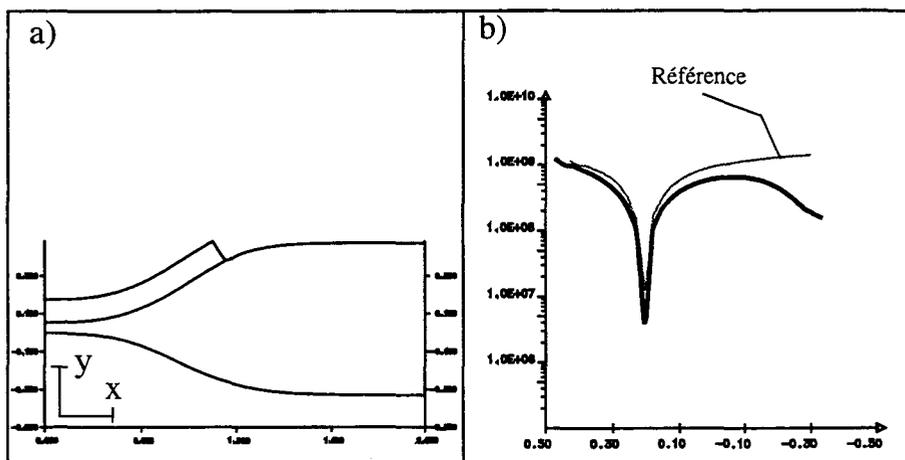


Figure 3 : Simulation du procédé LOCOS : a) forme d'oxyde pour $V_D=0$, b) comparaison des profils 1D de la pression en $x=1.5\mu\text{m}$ avec le cas standard.

De façon similaire, le coefficient de réaction, k_{si} , à l'interface est fonction des contraintes mécaniques. Plus le coefficient d'activation V_K est petit, plus cet effet est ignoré. Les figures 4(a) et 4(b) correspondent à une simulation où V_K et V_D sont nuls. Par comparaison avec les résultats précédents, on observe que négliger l'influence des contraintes sur le coefficient de réaction à peu d'effet sur la forme de l'oxyde d'une structure LOCOS. Par contre, ceci permet de diminuer très nettement le niveau de contraintes dans la silice. En effet, la constance de k_{si} le long de l'interface, ajoutée à celle de la diffusivité, favorise la croissance uniforme de l'oxyde et donc la minimisation des contraintes.

| Viscosité de l'oxyde (η_O) | Coefficient de plasticité de l'oxyde (V_{PO}) | Coefficient de réduction de la diffusivité (V_D) | Coefficient de réduction du taux de réaction (V_K) | Coefficient parabolique du modèle de Deal et Grove | Viscosité du nitrure (η_N) |
|-----------------------------------|---|--|--|--|-----------------------------------|
| $2 \cdot 10^{14}$ Poises | 425 A^3 | 0 A^3 | 0 A^3 | $0.343 \text{ } (\mu\text{m}^2/\text{h})$ | $5 \cdot 10^{15}$ Poises |

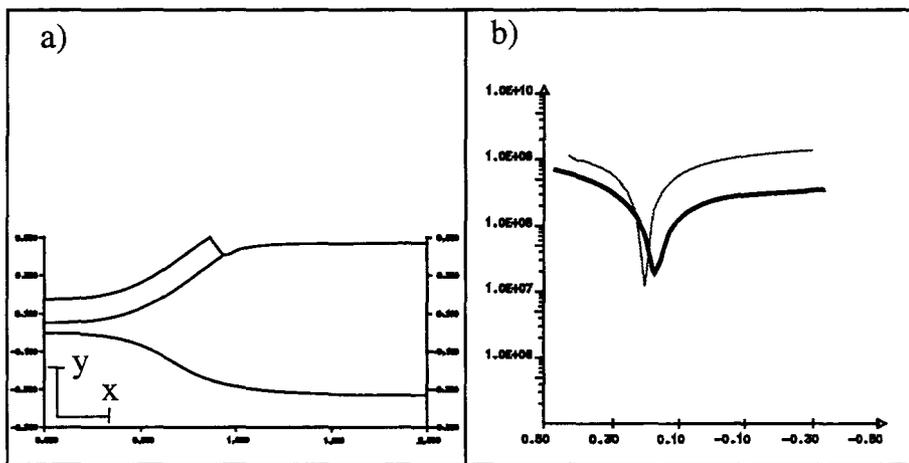


Figure 4 : Simulation du procédé LOCOS : a) forme d'oxyde pour $V_D=V_K=0$, b) comparaison des profils 1D de la pression en $x=1.5\mu\text{m}$ avec le cas standard.

En conclusion, la diffusivité et le coefficient de réaction à l'interface, dépendant des contraintes mécaniques, ont des effets considérables sur le volume d'oxyde créé et son état de contraintes. Plus leurs volumes d'activation respectifs sont grands, moins la quantité d'oxyde en croissance est importante et plus son niveau de contraintes est élevé. Cependant, d'après l'expérience [12], V_K et V_D ne dépendent pas des conditions d'oxydation. Il est donc nécessaire de les calibrer une seule fois, dans un cas d'oxydation typique.

2.3 Influence de la vitesse d'oxydation

Pour obtenir une faible vitesse d'oxydation, il faut imposer une basse température ou une ambiance sèche. Or, dans ces deux cas, l'augmentation importante de la viscosité de la silice contrebalance le bénéfice de la faible vitesse de déformation. Un compromis doit être recherché qui permet de minimiser à la fois la vitesse d'oxydation et la viscosité de l'oxyde.

Dans la simulation présentée ci-dessous, la diminution de la vitesse d'oxydation est traduite par une réduction du coefficient parabolique du modèle de Deal et Grove. Le temps d'oxydation est augmenté afin de faire croître la même épaisseur d'oxyde que précédemment.

L'analyse de la figure 5 montre que plus la vitesse d'oxydation est faible, plus le niveau de contraintes est réduit. Ceci s'explique par le fait que dans un modèle viscoélastique, les contraintes sont en partie proportionnelles à la vitesse de déformation. Par contre, on ne constate aucune modification significative à propos de la forme du bec d'oiseau.

| Viscosité de l'oxyde (η_O) | Coefficient de plasticité de l'oxyde (V_{PO}) | Coefficient de réduction de la diffusivité (V_D) | Coefficient de réduction du taux de réaction (V_K) | Coefficient parabolique du modèle de Deal et Grove | Viscosité du nitrure (η_N) |
|-----------------------------------|---|--|--|--|-----------------------------------|
| $2 \cdot 10^{14}$ Poises | 425 A^3 | 75 A^3 | 15 A^3 | $0.017 (\mu\text{m}^2/\text{h})$ | $5 \cdot 10^{15}$ Poises |

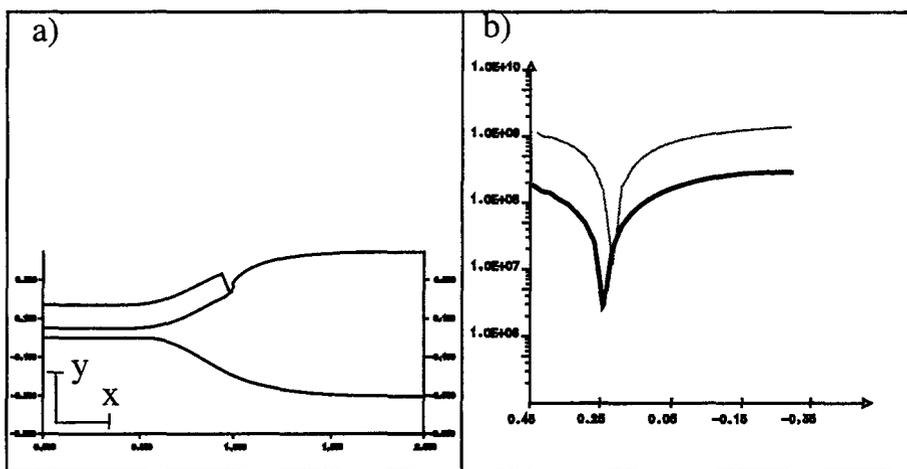


Figure 5 : Simulation du procédé LOCOS : a) forme d'oxyde pour une valeur du coefficient parabolique divisée par 20 (1990 minutes), b) comparaison du profil 1D de la pression en $x=1.5\mu\text{m}$ avec le cas standard.

2.4 Influence de la rigidité du masque d'oxydation

Le masque d'oxydation a deux rôles : il diminue la diffusion des agents oxydants et s'oppose mécaniquement à la croissance de l'oxyde. Plus sa rigidité est grande, plus son efficacité est élevée. Cependant, une trop forte rigidité induit un niveau de contraintes trop élevé dans les couches sous-jacentes et augmente ainsi le risque d'apparition de défauts cristallins dans le substrat.

| Viscosité de l'oxyde (η_O) | Coefficient de plasticité de l'oxyde (V_{PO}) | Coefficient de réduction de la diffusivité (V_D) | Coefficient de réduction du taux de réaction (V_K) | Coefficient parabolique du modèle de Deal et Grove | Viscosité du nitrure (η_N) |
|-----------------------------------|---|--|--|--|-----------------------------------|
| $2 \cdot 10^{14}$ Poises | 425 A^3 | 75 A^3 | 15 A^3 | $0.343 (\mu\text{m}^2/\text{h})$ | $1 \cdot 10^{17}$ Poises |

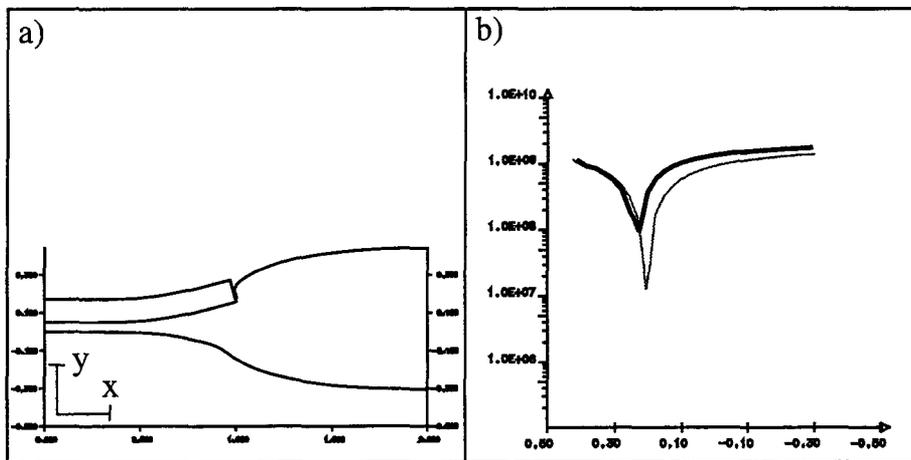


Figure 6 : Simulation du procédé LOCOS : a) forme d'oxyde pour une valeur de la viscosité du nitrure égale à 10^{17} , b) comparaison du profil 1D de la pression en $x=1.5\mu\text{m}$ avec le cas standard.

La modulation de la rigidité est obtenue de manière géométrique (épaisseur du masque) ou rhéologique (nature du matériau). C'est la seconde option qui est utilisée dans la simulation de la figure 6, où la viscosité du nitrure est augmentée de manière importante.

L'examen des résultats indique que plus le nitrure est rigide (grande viscosité), plus le bec d'oiseau est pincé et plus le niveau de contraintes dans l'oxyde augmente. On en déduit que les contraintes supplémentaires qu'induit le nitrure dans la silice ne peuvent être entièrement relaxées par l'écoulement non-linéaire de l'oxyde. Il faut donc trouver, à température constante, un compromis entre l'épaisseur du nitrure (c'est à dire le niveau de contrainte supplémentaire dans l'oxyde) et la longueur du bec d'oiseau. La conséquence directe de cet état de contrainte est l'écrasement plus important du bec d'oiseau.

2.5 Influence du comportement mécanique de l'oxyde

Le comportement mécanique de l'oxyde, de nature viscoélastique non-linéaire, dépend de la valeur de sa viscosité à faible niveau de contraintes, η_0 , et du volume d'activation du régime plastique, V_{PO} . Face à une sollicitation mécanique, il se déforme d'autant plus facilement que η_0 est faible et V_{PO} est grand. Les effets de ces deux paramètres sont successivement étudiés ci-dessous.

| Viscosité de l'oxyde (η_0) | Coefficient de plasticité de l'oxyde (V_{PO}) | Coefficient de réduction de la diffusivité (V_D) | Coefficient de réduction du taux de réaction (V_K) | Coefficient parabolique du modèle de Deal et Grove | Viscosité du nitrure (η_N) |
|-----------------------------------|---|--|--|--|-----------------------------------|
| $1 \cdot 10^{17}$ Poises | 425 A^3 | 75 A^3 | 15 A^3 | $0.343 (\mu\text{m}^2/\text{h})$ | $5 \cdot 10^{15}$ Poises |

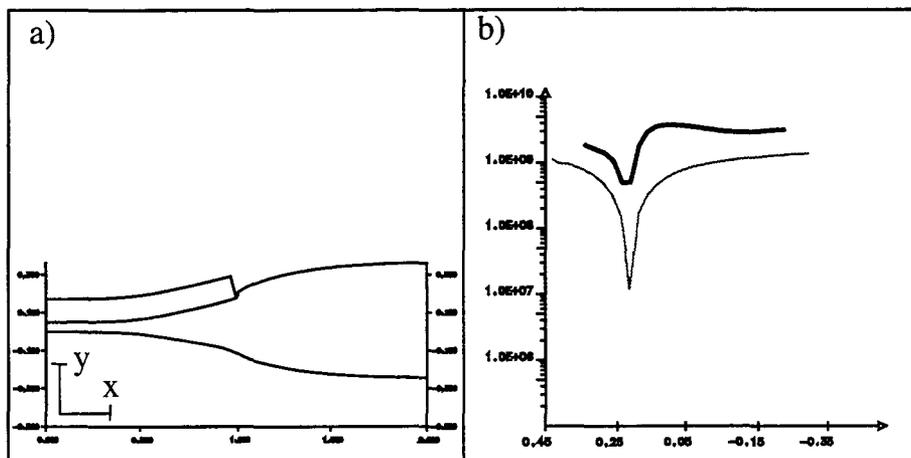


Figure 7 : Simulation du procédé LOCOS : a) forme d'oxyde pour une valeur de la viscosité de l'oxyde égale à 10^{17} , b) comparaison du profil 1D de la pression en $x=1.5\mu\text{m}$ avec le cas standard.

Premièrement, la viscosité de l'oxyde est augmentée de $2 \cdot 10^{14}$ Poises à $1 \cdot 10^{17}$ Poises. Ceci se traduit par un niveau de contraintes plus élevé dans la silice (figure 7).

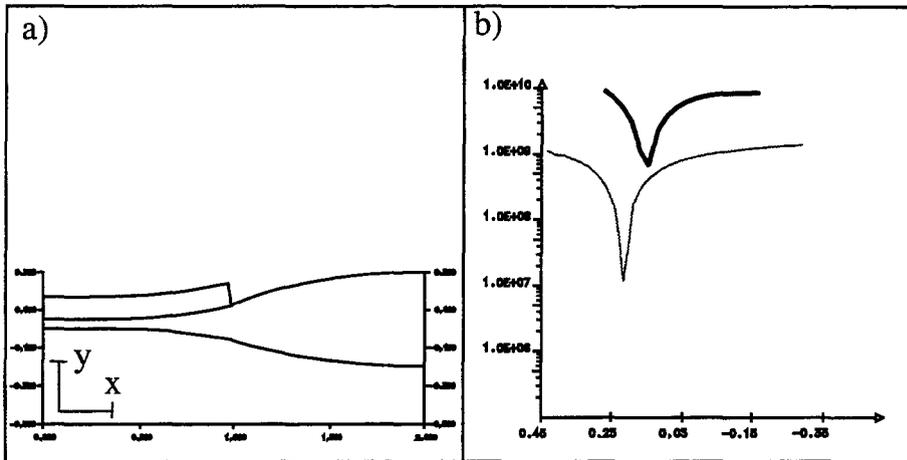
Or, pour obtenir une faible viscosité, il faut travailler à haute température, à haute pression ou en ambiance humide. Cependant, ces trois conditions correspondent à des vitesses d'oxydation élevées. Seule une calibration précise de l'évolution de la viscosité de l'oxyde en fonction de la température, de la pression et de l'ambiance de l'oxydation peut permettre de définir le meilleur compromis. La calibration en fonction de la température à été réalisée dans le cadre de ce travail. Des questions subsistent à propos des dépendances par rapport à la pression et l'ambiance [8].

En terme de forme, on observe une diminution de l'épaisseur de l'oxyde de champ ainsi que du bec d'oiseau. Ceci traduit que l'augmentation des contraintes se produit sur l'ensemble de la structure et justifie le rôle prépondérant de la viscosité de l'oxyde sur les caractéristiques géométriques et la fiabilité d'un dispositif d'isolation.

Dans un second temps, tout en conservant une valeur de viscosité élevée, le comportement plastique de l'oxyde est successivement annihilé ($V_{PO} = 0$) et exagérément forcé ($V_{PO} = 1000$).

La comparaison des figures 8b et 8d indique que l'introduction de la plasticité permet de diminuer le niveau de contraintes dans l'oxyde. Cependant, si cet effet est amplifié ($V_{PO}=1000$), il n'est pas possible de relaxer suffisamment les contraintes pour retrouver un niveau équivalent au cas standard. On constate à nouveau l'influence primordiale de η_O sur le niveau des contraintes. En terme de forme, la plasticité autorise un fluage plus important de la silice qui s'observe par un bec d'oiseau très étendu (figure 8c).

| Viscosité de l'oxyde (η_O) | Coefficient de plasticité de l'oxyde (V_{PO}) | Coefficient de réduction de la diffusivité (V_D) | Coefficient de réduction du taux de réaction (V_K) | Coefficient parabolique du modèle de Deal et Grove | Viscosité du nitrure (η_N) |
|-----------------------------------|---|--|--|--|-----------------------------------|
| $1 \cdot 10^{17}$ Poises | 0 A^3 | 75 A^3 | 15 A^3 | $0.343 \text{ } (\mu\text{m}^2/\text{h})$ | $5 \cdot 10^{15}$ Poises |



| Viscosité de l'oxyde (η_O) | Coefficient de plasticité de l'oxyde (V_{PO}) | Coefficient de réduction de la diffusivité (V_D) | Coefficient de réduction du taux de réaction (V_K) | Coefficient parabolique du modèle de Deal et Grove | Viscosité du nitrure (η_N) |
|-----------------------------------|---|--|--|--|-----------------------------------|
| $1 \cdot 10^{17}$ Poises | 1000 A^3 | 75 A^3 | 15 A^3 | $0.343 \text{ } (\mu\text{m}^2/\text{h})$ | $5 \cdot 10^{15}$ Poises |

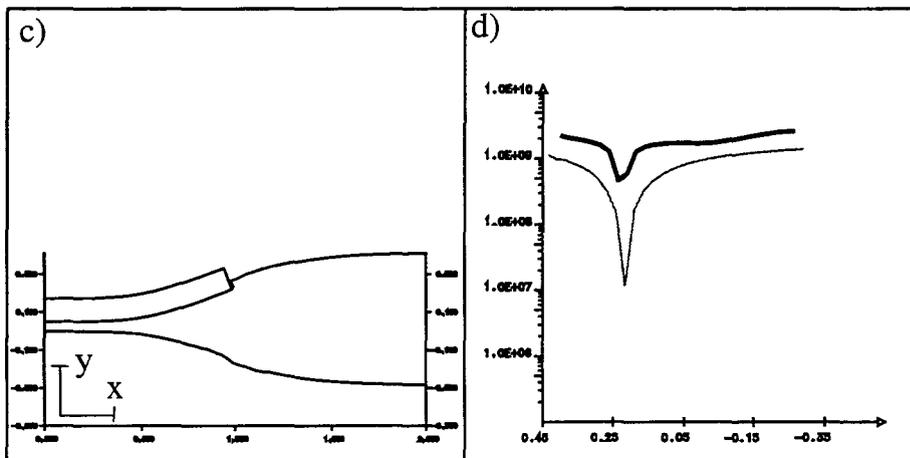


Figure 8 : Simulation du procédé LOCOS : a) forme d'oxyde pour $V_{PO}=0$ et $\eta_0=10^{17}$, c) forme d'oxyde pour $V_{PO}=1000$ et $\eta_0=10^{17}$, b) et d) comparaison des profils 1D de la pression en $x=1.5\mu\text{m}$ avec le cas standard.

3. CALIBRATION [13]

La modélisation numérique de l'oxydation du silicium qui a été développée dépend du niveau de contraintes dans la silice. Or, comme nous l'avons vu dans le second paragraphe, ce niveau dépend de la température, de la pression et de l'ambiance de l'oxydation. Par conséquent, avant de procéder à une étude quantitative d'une structure d'isolation, il est nécessaire de calibrer l'ensemble des paramètres pondérant l'influence des contraintes mécaniques sur les grandeurs physiques que sont les viscosités de la silice et du nitrure, la diffusivité des agents oxydants dans l'oxyde et le coefficient de réaction à l'interface. De plus, étant donné les épaisseurs infimes des matériaux utilisés, les propriétés de volume ne sont plus applicables et il est nécessaire de calibrer également les viscosités de l'oxyde et du nitrure. Ces paramètres et leur signification sont rappelées à la table I, avec leur notation.

Table I: Définition des paramètres du modèle numérique d'oxydation.

| Paramètres | Signification |
|------------|--|
| η_O | Viscosité de l'oxyde (Poises) |
| V_{PO} | Volume d'activation des contraintes sur la plasticité de l'oxyde (A^3) |
| η_N | Viscosité du nitrure (Poises) |
| V_{PN} | Volume d'activation des contraintes sur la plasticité du nitrure (A^3) |
| V_K | Volume d'activation des contraintes sur le coefficient de réaction (A^3) |
| V_D | Volume d'activation de la pression sur la diffusivité des oxydants (A^3) |

Sutardja [14] et Rafferty [12] ont proposé un jeu de coefficients (η_O , V_{PO} , V_K et V_D) permettant de reproduire les cinétiques d'oxydation des géométries convexes et concaves de Kao [15], dans l'hypothèse d'un comportement purement visqueux de la silice. Avec cette même hypothèse, des simulations calibrées de structures LOCOS ont été obtenues en considérant le nitrure soit élastique [16] soit visqueux [17]. Par contre, dans le cas de la modélisation viscoélastique non-linéaire, les résultats reportés dans la littérature [18, 19, 20 et 21] ne traitent que de cas technologiques bien identifiés et ne constituent pas une calibration globale.

La procédure de calibration originale qui a été mise au point permet de calibrer de manière auto-cohérente l'ensemble des paramètres. La méthode est appliquée pour le cas des oxydations en ambiance humide, à pression atmosphérique, pour une gamme de température allant de 800°C à 1100°C.

La calibration s'effectue en deux temps. D'abord, les propriétés mécaniques de l'oxyde sont déterminées ainsi que les volumes d'activation des contraintes sur la diffusivité et le coefficient de réaction. Ensuite, les paramètres du nitrure sont définis indépendamment.

3.1 L'oxyde

Les expériences de Kao [15] permettent une calibration directe des propriétés de l'oxyde. Ces résultats expérimentaux enregistrent la variation de l'épaisseur d'oxyde en fonction du rayon de courbure des motifs de silicium - en fin d'oxydation - pour des structures de formes convexe (cylindres) et concave (trous circulaires). Cette variation de l'épaisseur d'oxyde est directement liée au niveau de contraintes présent dans la silice et dépendant du rayon de courbure. Les rayons de courbures investigués sont compris entre 0.5 et 10 microns. Les conditions d'oxydation sont résumées à la table II.

Table II : Conditions d'oxydation des expériences de Kao en ambiance humide pour un substrat plan.

| Température (°C) | 800 | 900 | 1000 | 1100 |
|-----------------------------|------|------|------|------|
| Temps d'oxydation (min.) | 1440 | 300 | 96 | 40 |
| Epaisseur d'oxyde (100) (Å) | 5027 | 4575 | 4735 | 4880 |

Etant donné l'importance de l'influence de la vitesse d'oxydation sur le développement des contraintes, le premier travail a consisté à ajuster les coefficients linéaires et paraboliques du modèle de Deal et Grove sur la cinétique 1D mesurée par

Kao. Dans un second temps, des structures convexes et concaves ont été paramétrées et implantées analytiquement dans IMPACT-4. La figure 9 présente une de ces structures avec un maillage typique dans la silice.

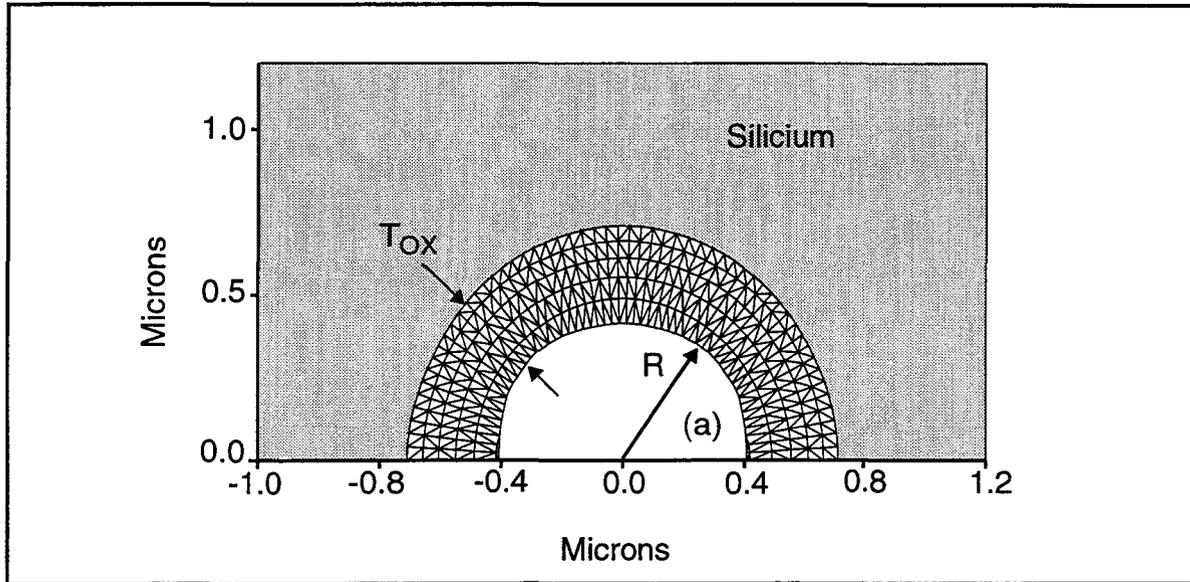


Figure 9 : Maillage à l'issue de l'oxydation d'une structure concave.

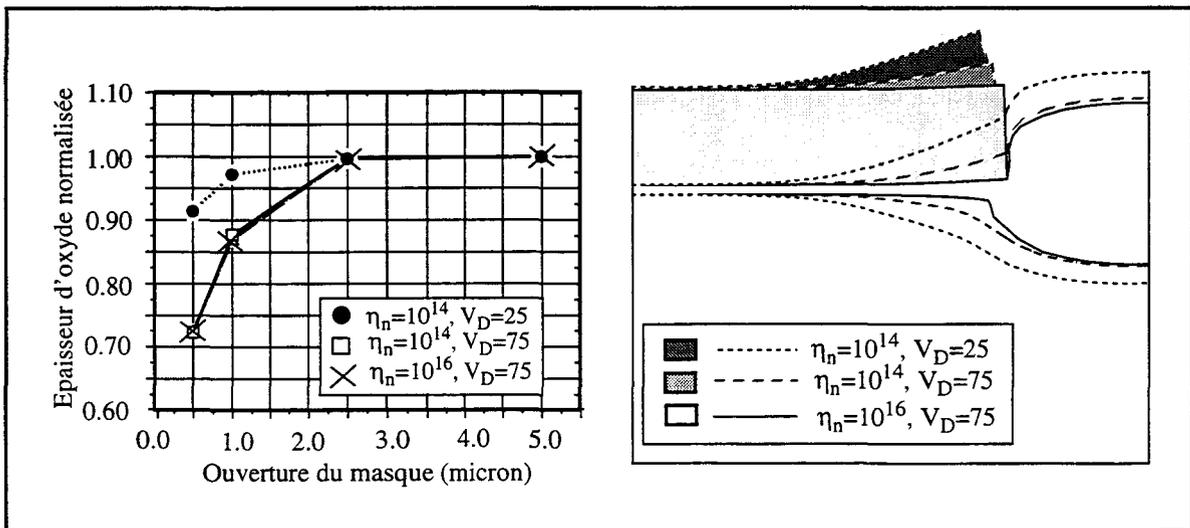


Figure 10 : Influence du coefficient V_D et de la viscosité du nitrure sur l'épaisseur centrale de l'oxyde de champ.

Cependant, les expériences de Kao ne permettent pas à elles seules de déterminer de manière absolue les quatre coefficients : (η_O , V_{PO} , V_K et V_D) [12]. Il est nécessaire d'avoir recours à une expérimentation supplémentaire. L'analyse des résultats de simulation d'une structure LOCOS [22] a permis de mettre en évidence que, une fois connues les valeurs de (η_O , V_{PO} et V_K), pour des ouvertures intermédiaires du masque de nitrure ($\approx 1 \mu\text{m}$), l'épaisseur centrale de l'oxyde de champ est uniquement fonction du paramètre V_D (figure 10a). Cette épaisseur d'oxyde est parfaitement indépendante des caractéristiques mécaniques du nitrure. Ces dernières n'influent que sur la forme du bec d'oiseau (figure 10b).

Par conséquent, l'organigramme suivant (figure 11) a été défini :

La valeur initiale de V_D est choisie arbitrairement.

Les structures concaves possédant un rayon de courbure important fournissent la calibration de η_O (A). En effet, sur les substrats concaves l'oxyde est en compression et la cinétique d'oxydation dépend de V_D et de la viscosité de l'oxyde. Cependant, comme les rayons de courbure sont importants, le niveau de contraintes n'est pas suffisant pour déclencher le régime plastique. Par conséquent, comme V_D est fixé, seul η_O peut servir de paramètre d'ajustement.

Au contraire, pour des rayons de courbure très petits (B), l'oxyde subit des déformations plastiques générées par le niveau élevé des contraintes de cisaillement. La simulation de ces structures permet de déduire la valeur du volume d'activation des contraintes sur la plasticité de l'oxyde V_{PO} .

Les structures convexes mettent l'oxyde en tension (pression négative). La réduction de la diffusivité des oxydants n'existe pas pour ces structures. Par conséquent, la réduction de la cinétique d'oxydation qui y est observée ne peut s'expliquer que par une réduction du coefficient de réaction, V_K , que l'on calibre à partir des substrats convexes (C).

A partir des valeurs de (η_O , V_{PO} et V_K) précédemment déduites, la structure LOCOS est simulée et le coefficient V_D est réajusté afin d'obtenir l'épaisseur de champ (T_{OX}) correcte (D).

La procédure est alors répétée à partir de l'étape (A). Lorsque ces quatre coefficients sont déterminés pour une température, la méthode de calibration se simpli-

fié puisque l'on considère que V_K et V_D sont indépendants de la température [23]. Il suffit alors d'ajuster η_O et V_{PO} à partir des structures concaves.

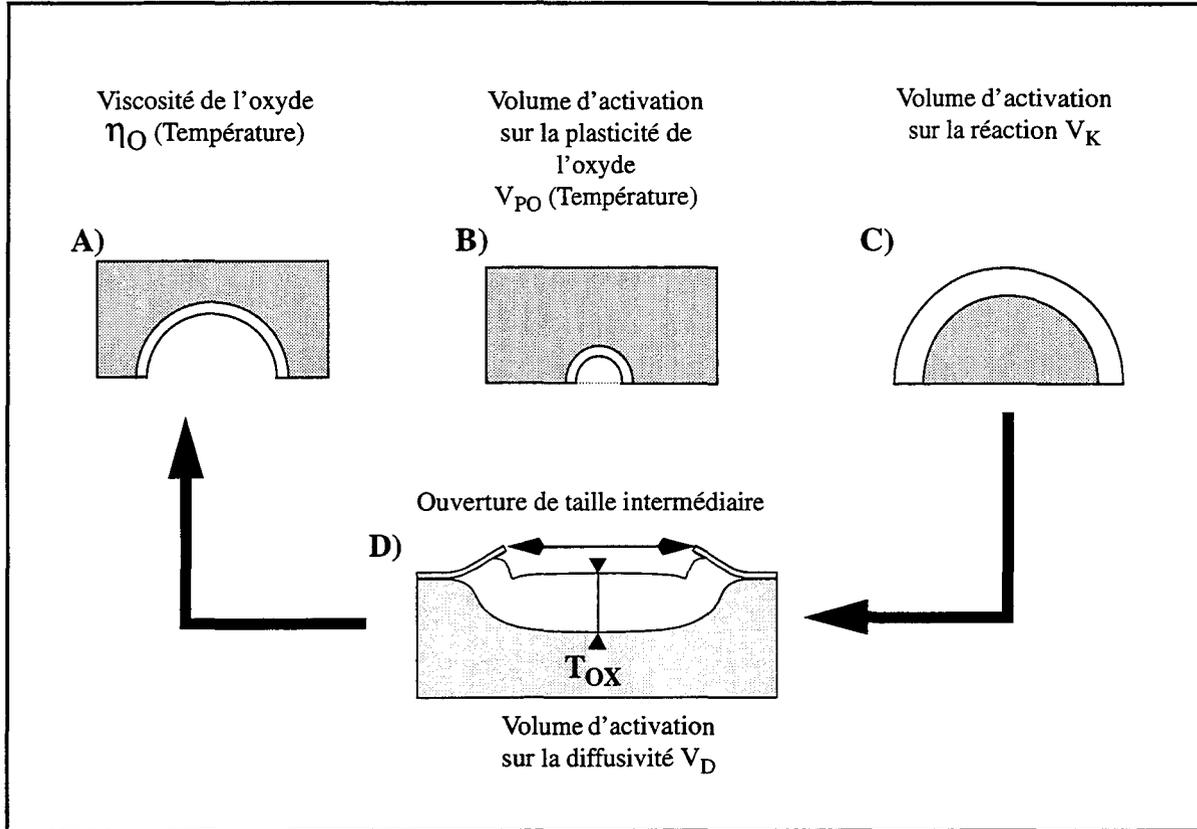


Figure 11 : Organigramme explicitant la procédure d'extraction des paramètres relatifs à l'oxyde pour le modèle viscoélastique non-linéaire.

La figure 12 donne des résultats typiques de cette procédure expérimentale pour les deux types de structures, concave et convexe. Pour une structure convexe, le tracé d'iso-valeurs, σ_{xx} , de la figure 12a confirme que les contraintes radiales et tangentielles sont respectivement compressives ($\sigma_{xx} < 0$ en $y=0$) et tensiles ($\sigma_{xx} > 0$ en $x=0$). Par contre, pour la forme concave (figure 12b), le tracé d'iso-valeurs, σ_{yy} indique qu'elles sont toutes les deux compressives.

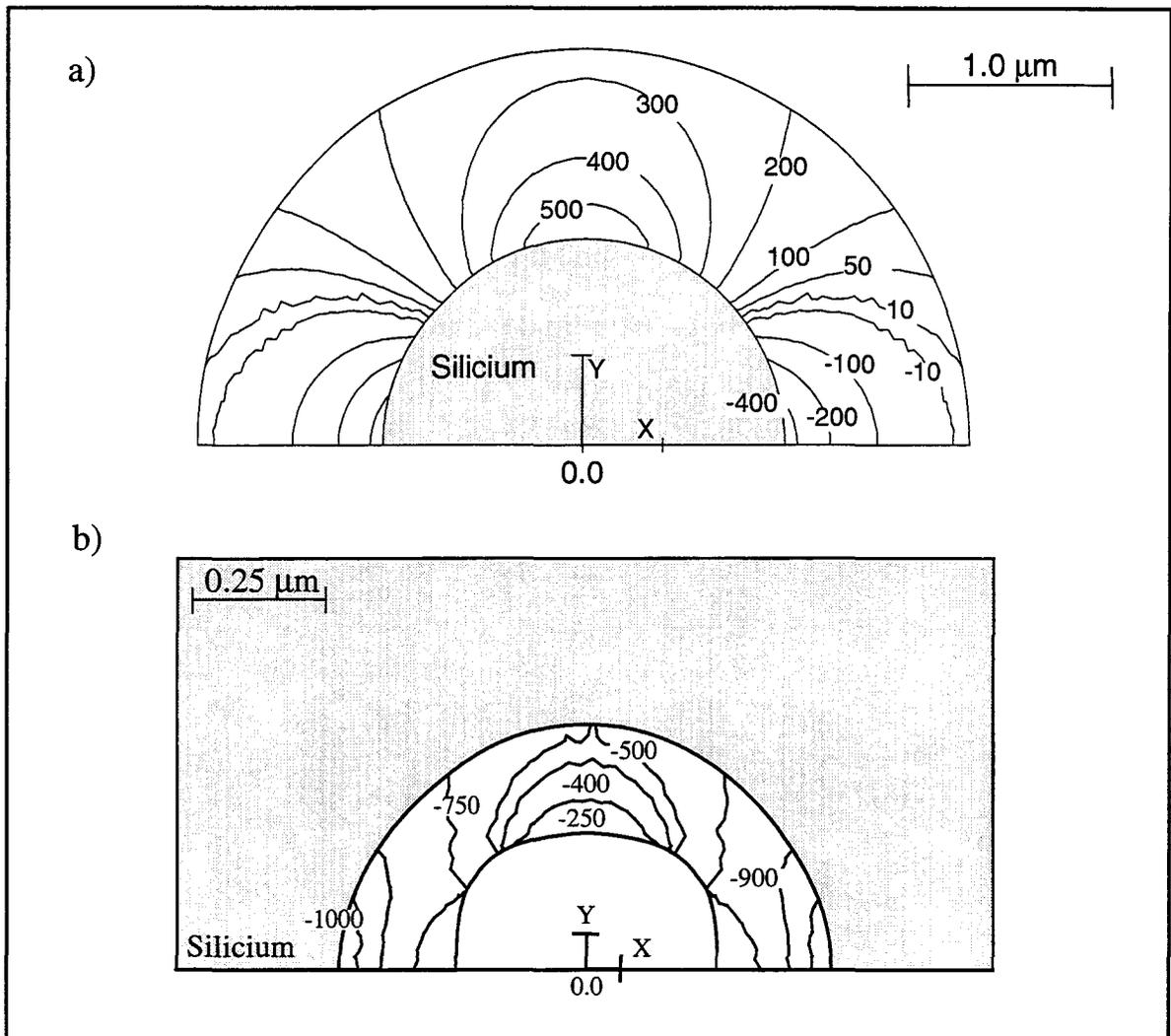


Figure 12 : Résultats de simulation des structures analytiques de Kao : Iso-valeurs de contraintes (MPa) pour a) une structure convexe (contraintes normales en X), b) une structure concave (contraintes normales en Y).

Les figures 13 et 14 comparent l'évolution simulée et expérimentale des épaisseurs d'oxyde en fonction du rayon de courbure final. Un bon accord est obtenu pour une large gamme de température d'oxydation de 800°C à 1100°C. Les valeurs optimisées des paramètres sont regroupées dans la table III.

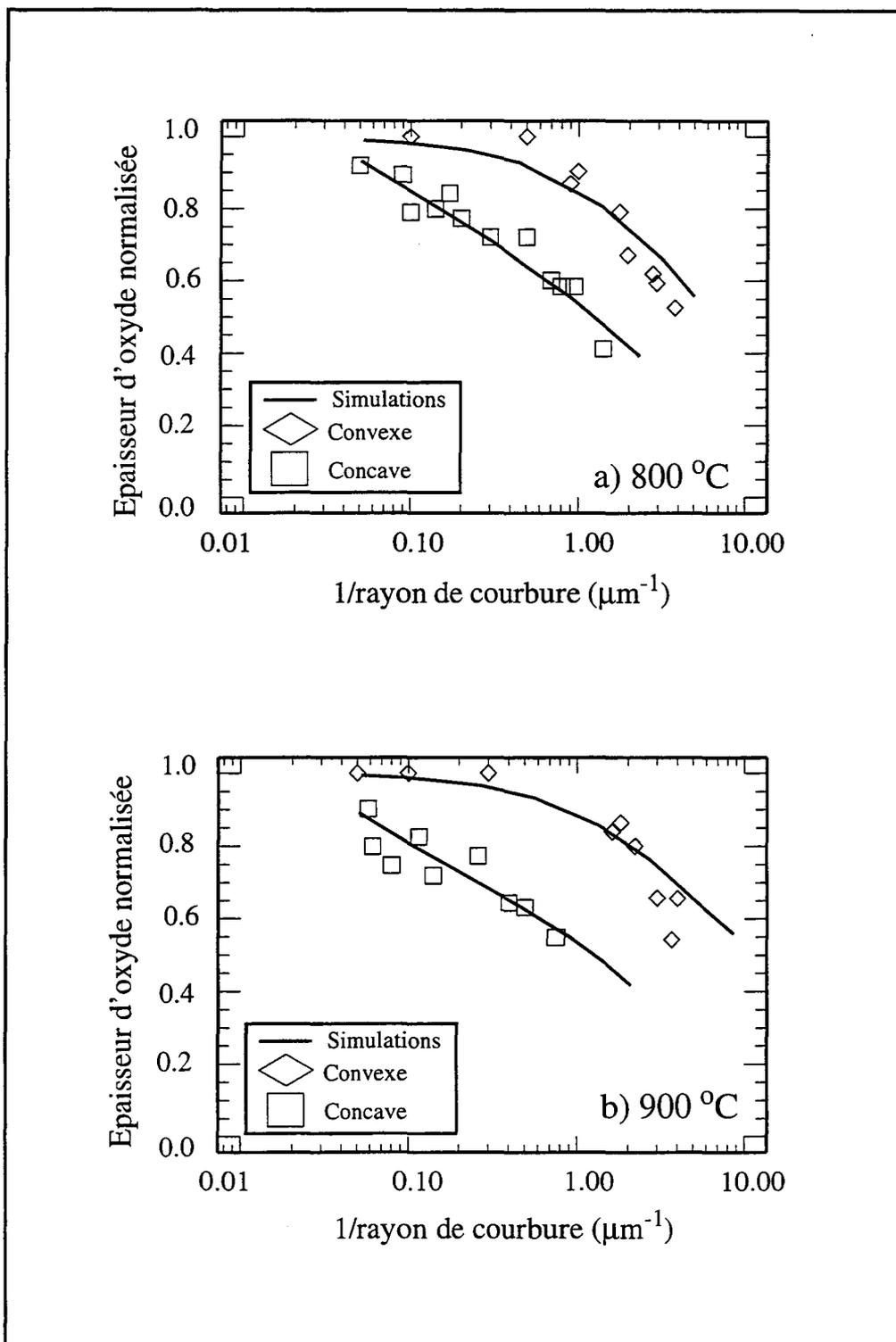


Figure 13 : Variation des épaisseurs d'oxyde en fonction du rayon final de l'interface Si/SiO₂ pour une oxydation réalisée à : a) 800°C, b) 900°C. Les épaisseurs d'oxyde sont normalisées à leurs valeurs 1D.

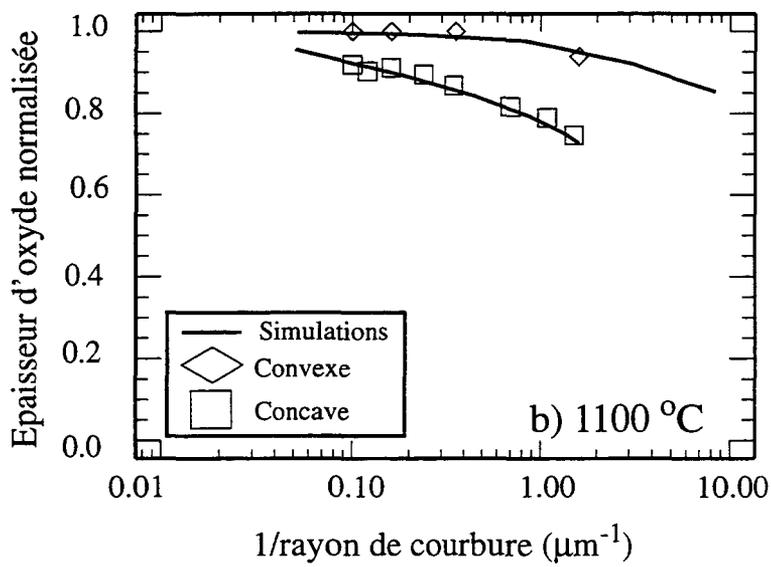
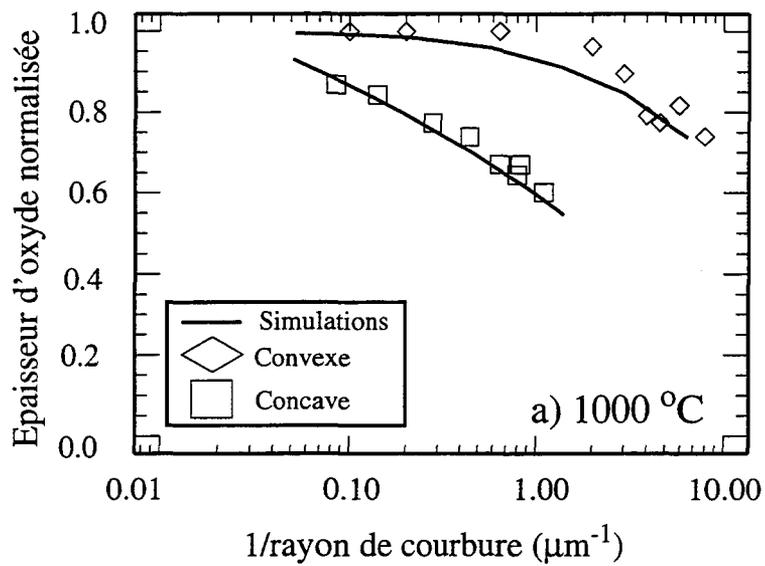


Figure 14 : Variation des épaisseurs d'oxyde en fonction du rayon final de l'interface Si/SiO₂ pour une oxydation réalisée à : a) 1000°C, b) 1100°C. Les épaisseurs d'oxyde sont normalisées à leurs valeurs 1D.

3.2 Le nitrure [24]

Comme il n'y a pas d'équivalent, pour le nitrure, de la procédure expérimentale de Kao, la détermination des paramètres s'effectue à partir de simulations de structures LOCO. Les résultats de simulations présentés à la figure 10 indiquent clairement que le profil du bec d'oiseau dépend fortement des propriétés mécaniques du nitrure. La longueur de la zone de transition (B_2) et la déflexion correspondante du nitrure (H_3) ont été choisies comme caractéristiques géométriques du LOCOS (figure 15). La procédure d'extraction se focalise sur l'ajustement de ces paramètres géométriques pour déduire les valeurs de η_N et V_{PN} . Les isolations réalisées avec des couches épaisses de nitrure donnent accès à la viscosité seule dans la mesure où les faibles déflexions observées n'activent pas le régime plastique. Par contre, le volume d'activation de la plasticité se déduit de structures ayant des couches minces pour lesquelles les déformations du nitrure sont importantes. Ces extractions exploitent bien-sûr les valeurs déjà calibrées de l'oxyde.

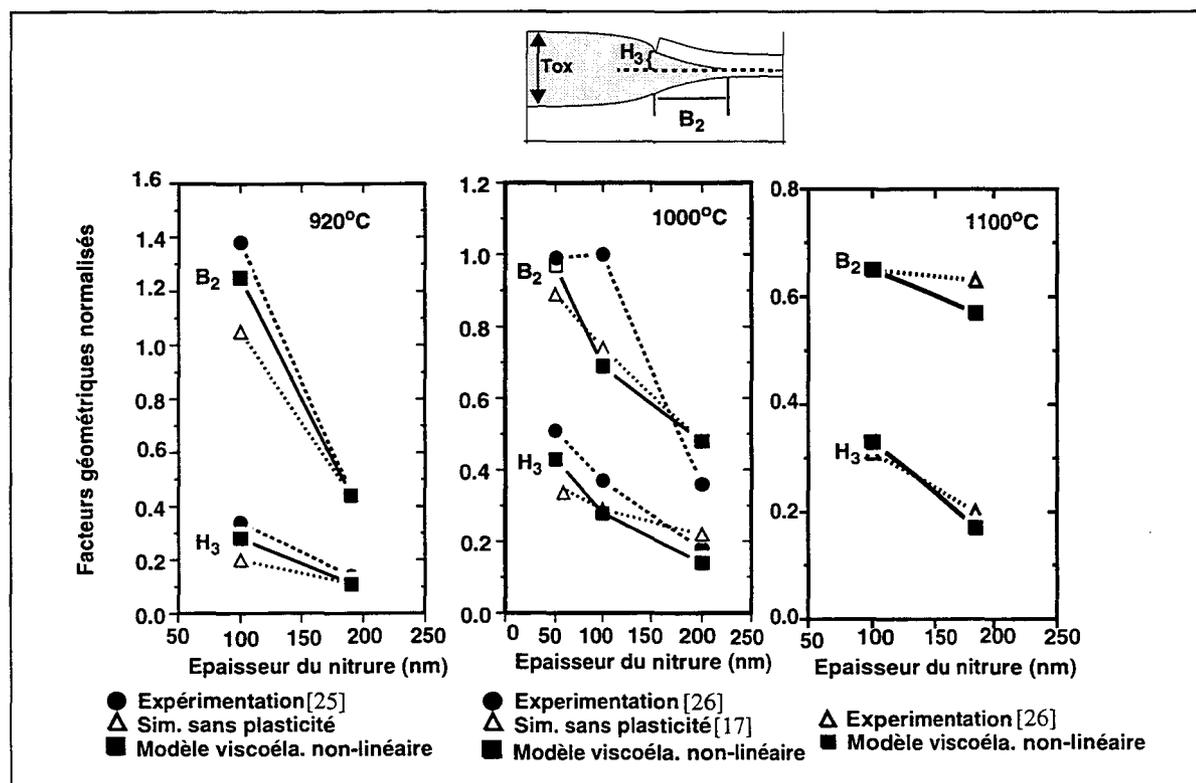


Figure 15 : Variation de la déflexion du nitrure et de la longueur de la zone de transition en fonction de l'épaisseur du nitrure. Les paramètres B_2 et H_3 sont normalisés par T_{OX} .

La figure 15 compare les caractéristiques géométriques expérimentales et simulées des transitions oxyde mince / oxyde épais pour des LOCOS réalisés dans la gamme 900°C-1100°C. Cette figure inclut également des résultats numériques obtenus avec des modèles du nitrure purement viscoélastique à 920°C ($V_{PN}=0$), et purement visqueux [17] à 1000°C. L'introduction de la plasticité reproduit plus correctement l'influence prépondérante de l'épaisseur des couches de nitrure sur les formes de LOCOS. Les longueurs importantes des transitions, B_2 , et les fortes déflexion, H_3 , mesurées pour des couches de nitrure inférieures à 100 nm correspondent à une relaxation accélérée des contraintes dans le nitrure imputable à sa plasticité.

Le jeu de paramètres final, table III, donne un accord global très satisfaisant sur l'ensemble de la gamme expérimentale.

Table III : Ensemble des paramètres calibrés pour le modèle viscoélastique non-linéaire.

| Température (°C) | V_D (Å ³) | V_K (Å ³) | η_O (Poises) | V_{PO} (Å ³) | η_N (Poises) | V_{PN} (Å ³) |
|------------------|-------------------------|-------------------------|-------------------|----------------------------|-------------------|----------------------------|
| 800 | 75 | 15 | 9.10^{15} | 300 | 6.10^{16} | 120 |
| 900 | | | 6.10^{15} | 390 | 3.10^{16} | 130 |
| 1000 | | | 2.10^{14} | 425 | 5.10^{15} | 170 |
| 1100 | | | 4.10^{13} | 1000 | 1.10^{15} | 350 |

3.3 Validation

Afin de tester la validité de cette calibration, des structures LOCOS de tailles réduites, démontrant des effets bidimensionnels typiques de l'oxydation du silicium, ont été simulées.

Le premier exemple concerne les variations de l'épaisseur centrale de l'oxyde de champ en fonction de l'ouverture du masque de nitrure (figure 16). Les résultats expérimentaux ont été obtenus par Coulman [22]. On s'aperçoit que si le

nitruire de silicium est modélisé comme un matériau viscoélastique linéaire, alors les contraintes mécaniques qu'il induit dans l'oxyde, pour des ouvertures du masque extrêmement petites, sont trop importantes. Ceci se traduit par un amincissement plus prononcé que la réalité. Au contraire, si un écoulement plastique est autorisé, alors l'accord avec l'expérience devient meilleur.

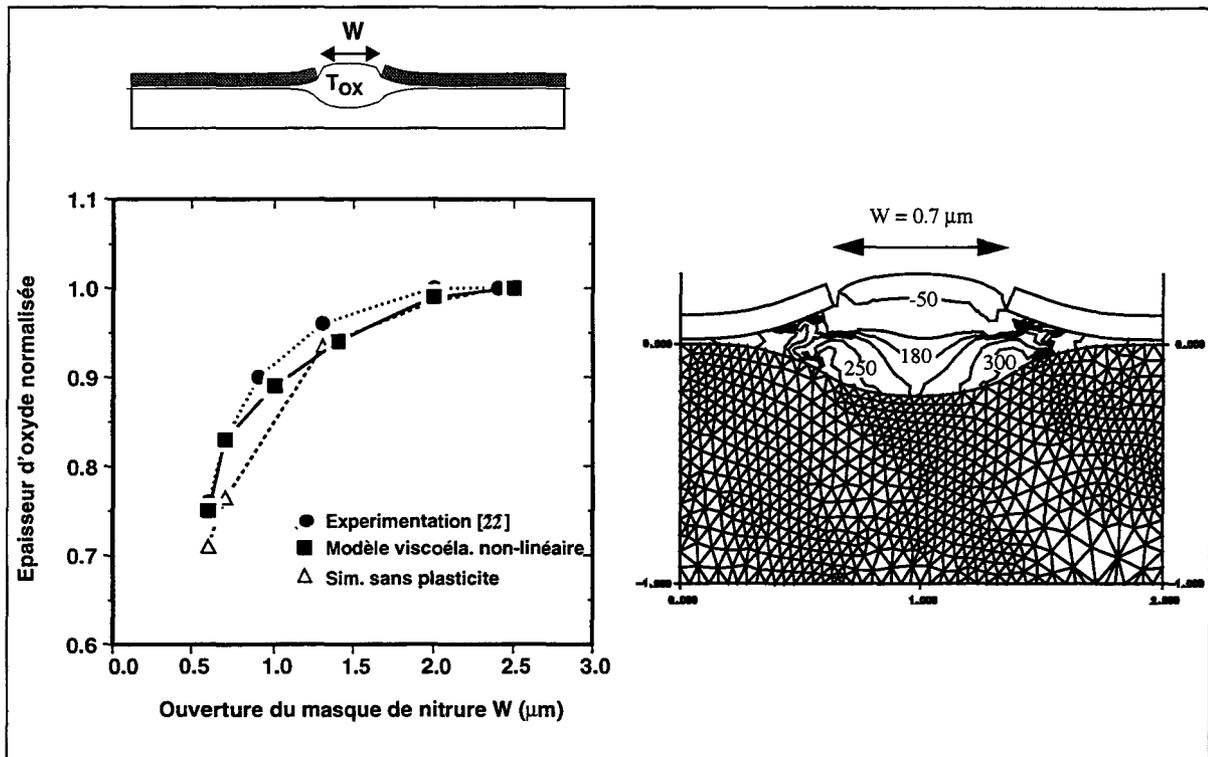


Figure 16 : Réduction de l'épaisseur de l'oxyde de champ en fonction de l'ouverture du masque d'oxydation. Le procédé est réalisé à 1000°C, l'épaisseur du piédestal vaut 20 nm et l'épaisseur du nitruire est égale à 100 nm. Le résultat de simulation pour une ouverture de 0.7 micron est présenté avec la distribution de la pression hydrostatique (Unités : MPa).

Le résultat de simulation correspondant à une ouverture de 0.7 μm montre nettement l'extension de la zone de fortes contraintes vers le centre de la structure. L'épaisseur centrale de l'oxyde est de 513 nm, réduite d'un facteur 1.2 par rapport à l'épaisseur 1D correspondante.

Le dernier exemple est relatif au phénomène de perçage de l'oxyde observé pour des masques d'oxydation étroits. D'après le résultat expérimental (figure 17a), on constate que la déflexion du nitrure atteint un minimum pour des longueurs intermédiaires du masque. Une analyse des contraintes [27] indique qu'un effet de levier apparaît pour des longueurs submicroniques. Ceci se traduit par une augmentation de la force exercée par le nitrure contre la croissance de l'oxyde, à chaque bord du masque. Ainsi, le bec d'oiseau se retrouve réduit. En dessous de $0.6 \mu\text{m}$, les profils des concentrations en oxydants se rejoignent sous le masque qui perd toute son efficacité comme le montrent les formes d'oxyde simulées (figure 17b).

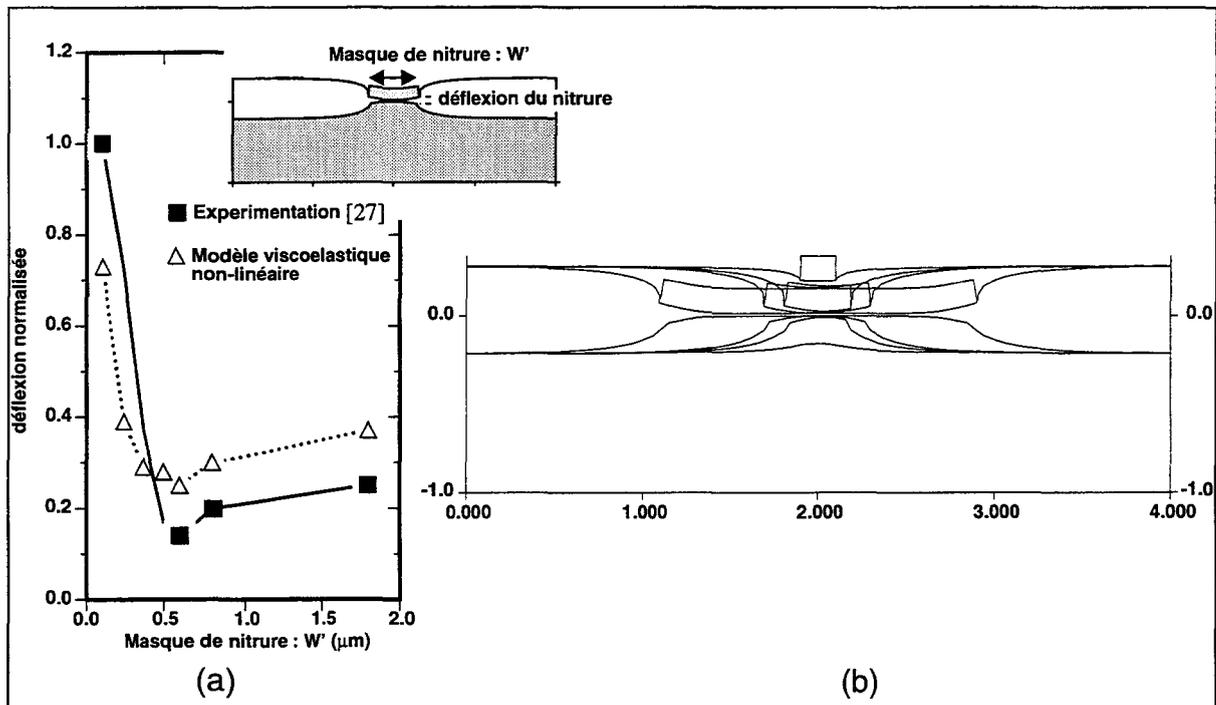


Figure 17 : Variation de la déflexion normalisée du nitrure, H_3T_{OX} avec la largeur du masque de nitrure : a) Confrontation aux résultats expérimentaux obtenus à 1000°C , épaisseur d'oxyde : 15 nm , épaisseur du nitrure : 140 nm [27], b) simulations correspondantes, $W'=1.8 \mu\text{m}$, $0.6 \mu\text{m}$, $0.37 \mu\text{m}$ et $0.1 \mu\text{m}$.

Cette validation globale de la procédure de calibration autorise l'étude quantitative des modèles non-linéaires visqueux et viscoélastique et la détermination de leur domaine d'application respectif.

4. DOMAINES DE VALIDITE DES MODELES NON-LINEAIRES VISQUEUX ET VISCOELASTIQUES [28]

4.1 Cas particulier de l'oxydation d'un substrat cylindrique

L'étude de l'oxydation d'un cylindre de silicium est particulièrement intéressante pour comprendre les différences qui existent entre les modèles rhéologiques exposés au chapitre III. En effet, cette structure autorise un calcul analytique en symétrie axiale du problème de l'oxydation. L'étude de ce cas idéal d'oxydation non-plane du silicium a déjà été réalisée en supposant l'oxyde comme un corps élastique [29], viscoélastique [30 et 31] et visqueux [23 et 32]. Rafferty [33] a introduit l'effet de plasticité (viscosité non-constante) dans le cas où l'oxyde est visqueux.

Dans notre cas, nous nous focalisons sur l'étude de la composante tangentielle (σ_θ) de la contrainte présente dans l'oxyde considérant que la silice possède un comportement : 1) élastique, 2) visqueux linéaire, 3) viscoélastique linéaire, 4) visqueux non-linéaire et 5) viscoélastique non-linéaire. L'analyse est menée pour deux températures d'oxydation, respectivement 800 et 1000°C. Etant donné que la nature de l'oxyde ne dépend que du déviateur du tenseur des contraintes (paragraphe 2.2.3 du chapitre III), l'oxyde est supposé incompressible, afin de simplifier les calculs.

Considérons un cylindre de silicium de rayon a , recouvert d'une fine couche d'oxyde d'épaisseur $(b-a)$, oxydé uniformément avec une vitesse V_{ox} normale à l'interface Si/SiO₂ (figure 18). L'hypothèse d'incompressibilité impose que la vitesse radiale soit égale à $a.V_{ox}/r_0$ en tout point situé à une distance r_0 ($a < r_0 < b$) [33]. De plus, la symétrie de la structure oblige que la composante tangentielle de la vitesse d'oxydation soit nulle et donc que les contraintes de cisaillement le soient également.

Après un intervalle de temps ΔT , une nouvelle épaisseur X_{ox} d'oxyde a été créée au niveau de l'interface. Par conséquent, tout élément $drd\theta$ situé initialement en r_0 est poussé vers la surface externe de l'oxyde suivant une vitesse radiale : $a.(1-\alpha).X_{ox}/\Delta T/r_0$ où α est le rapport volumétrique de la réaction. Cet élément subit donc un déplacement de r_0 en r qui a pour résultat de le distendre. Ceci se traduit par la création d'une contrainte normale tangentielle en tension (σ_θ) et d'une contrainte normale radiale en compression (σ_r).

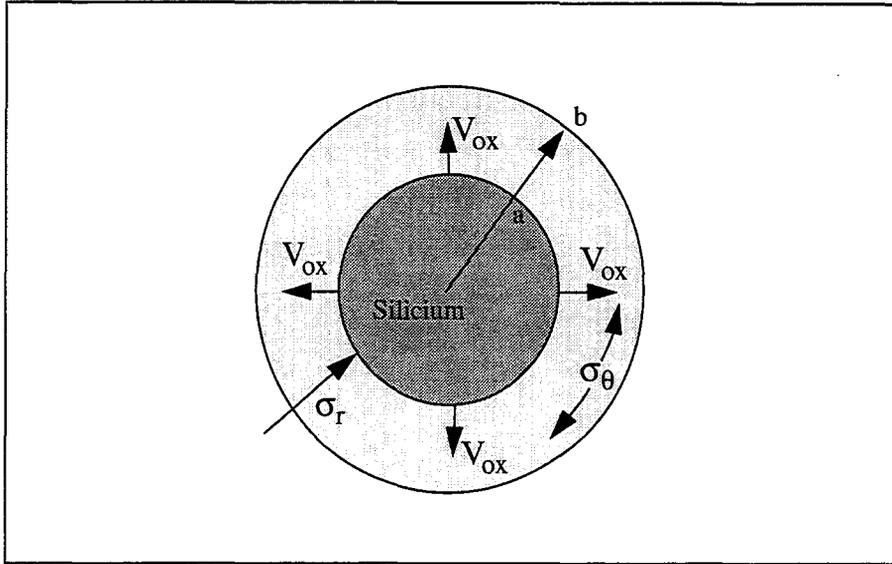


Figure 18 : Oxydation d'un substrat cylindrique : définition des variables.

L'élément $rd\theta$ subit donc tangentiellement une déformation égale à :

$$\varepsilon_{\theta} = \frac{(r - r_0)}{r_0} = a(1 - \alpha) \frac{X_{ox}}{r_0} \quad (1)$$

La question est de savoir comment cette déformation s'accomplit. Si l'oxyde est très résistant (comportement élastique) alors le niveau de contraintes est élevé. Au contraire, s'il oppose peu de résistance, un niveau de contraintes relativement faible se développe. Dans le cas le plus général, la contrainte (σ_{θ}) dépend de la déformation et/ou de la vitesse de déformation. Il est donc nécessaire d'estimer la vitesse d'oxydation $d(X_{ox})/dt$. Si X_{ox} reste petit devant r_0 , la loi de Deal et Grove est applicable [32] et on obtient :

$$\frac{dX_{ox}}{dt} = \left[\frac{1}{\left(\frac{B}{A}\right)^2} + 4\frac{t}{B} \right]^{-\frac{1}{2}} = \dot{X}_{ox} \quad (2)$$

où (B/A) et B sont les constantes linéaire et parabolique et t représente le temps.

REMARQUE : Dans les résultats qui sont présentés, les effets des contraintes sur la diffusivité des agents oxydants (c'est à dire sur B) et le coefficient de réaction à l'interface (i.e. sur B/A) sont ignorés.

D'après le paragraphe 2.2.3 du chapitre III, les relations qui unissent la contrainte σ_θ et la déformation ϵ_θ , dans le cas particulier de matériaux incompressibles, s'écrivent :

□ Matériau élastique

$$\sigma_\theta = Ga \frac{(1-\alpha)}{r_0^2} \int_0^t \dot{X}_{ox} d\tau \quad (3)$$

où G est le module de rigidité du matériau.

□ Matériau visqueux

○ Linéaire

$$\sigma_\theta = \eta_0 a \frac{(1-\alpha)}{r_0^2} \dot{X}_{ox} \quad (4)$$

où η_0 est la viscosité du matériau à faible niveau de contrainte.

○ Non-linéaire

$$\sigma_\theta = \eta_0 \frac{\sigma_\theta}{\sigma_c} a \frac{(1-\alpha)}{r_0^2} \frac{\dot{X}_{ox}}{\sinh\left(\frac{\sigma_\theta}{\sigma_c}\right)} \quad (5)$$

où $\sigma_c = 2KT/V_{PO}$, K étant la constante de Boltzmann et T la température.

□ Matériau viscoélastique

○ Linéaire

$$\left(\frac{\dot{\sigma}_\theta}{G} + \frac{\sigma_\theta}{\eta_0} \right) = a \frac{(1-\alpha)}{r_0^2} \dot{X}_{ox} \quad (6)$$

○ Non-linéaire

$$\left(\frac{\dot{\sigma}_\theta}{G} + \frac{\sigma_c}{\eta_0} \sinh \left(\frac{\sigma_\theta}{\sigma_c} \right) \right) = a \frac{(1-\alpha)}{r_0^2} \dot{X}_{ox} \quad (7)$$

Ces cinq équations ont été résolues par une méthode de calcul formel [34] dans le cas où $r_0 = a = 0.1 \mu\text{m}$. Les valeurs du module de rigidité et de la viscosité de l'oxyde sont celles rapportées au tableau II du chapitre III et au tableau III du chapitre IV. Les valeurs des coefficients linéaires et paraboliques sont standards [35] correspondant à une oxydation en ambiance humide.

Les figures 19a et 19b présentent le résultat de ces calculs pour des températures respectivement égales à 800 et 1000°C. Leur comparaison indique que pour les modèles visqueux et viscoélastique linéaires, la diminution de la température s'accompagne d'une augmentation du niveau de contraintes liée essentiellement à l'augmentation de la viscosité. L'introduction des non-linéarités adoucit cette différence. Par contre, pour le comportement élastique, le niveau de contraintes augmente avec la température, ceci parce que la vitesse d'oxydation augmente avec la température.

On constate également qu'au fur et à mesure de la croissance de l'oxyde, la dérivée temporelle des contraintes, initialement positive (cas élastique et viscoélastiques) ou nulle (cas visqueux), s'infléchit (cas élastique) ou change de signe (cas visqueux et viscoélastiques) traduisant le passage du régime de croissance linéaire au régime de croissance parabolique. On s'aperçoit ainsi que les modèles viscoélastiques permettent de mettre en évidence l'existence d'un maximum de contraintes, fonction de la température, qui se produit pour des épaisseurs d'oxyde relativement faibles (<100nm). Au contraire les modèles visqueux ne prédisent pas ce maximum et génèrent un niveau de contraintes bien supérieur.

L'introduction des non-linéarités possède deux conséquences: 1) elle réduit le niveau des contraintes, 2) elle diminue le temps de relaxation des contraintes du modèle viscoélastique ($\tau_{\text{linéaire}} \rightarrow \tau_{\text{non-linéaire}}$). Cette dernière caractéristique a pour résultat d'augmenter la plage de validité du modèle visqueux non-linéaire.

Par conséquent, pour un matériau donné, la validité d'un modèle visqueux non-linéaire ou viscoélastique non-linéaire dépend de la valeur du temps de relaxation. Puisque les modules de rigidité de la silice et du nitrure de silicium sont considérés constants dans les conditions de fabrication des circuits intégrés, le facteur déterminant est la viscosité. Des valeurs faibles (hautes températures, hautes pressions et ambiances humides) autorisent l'utilisation du modèle visqueux non-linéaire, alors que des valeurs élevées (basses températures, faibles pressions et ambiances sèches) nécessitent un modèle viscoélastique non-linéaire comme l'illustre l'exemple suivant.

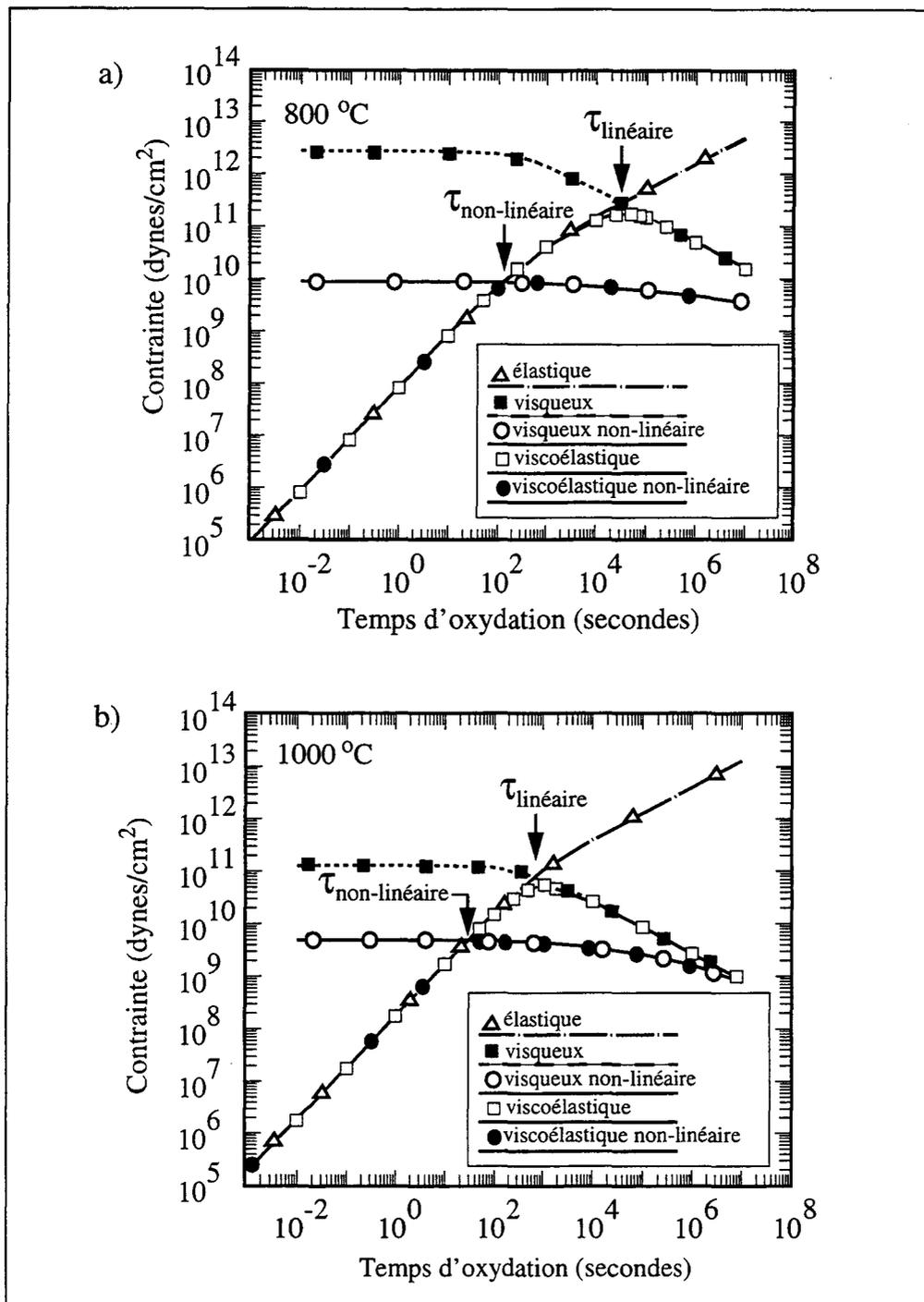


Figure 19 : Variation temporelle de la contrainte tangentielle au sein d'un oxyde de silicium en croissance sur un substrat cylindrique pour une température de a) 800°C, b) 1000°C. Les comportements élastiques, visqueux linéaires et non-linéaires, viscoélastiques linéaires et non-linéaires sont représentés. $\tau_{\text{linéaire}}$ et $\tau_{\text{non-linéaire}}$ sont respectivement les temps de relaxation des modèles viscoélastiques linéaires et non-linéaires.

L'oxydation d'un cylindre de silicium de rayon $1.2 \mu\text{m}$, recouvert d'une couche d'oxyde d'épaisseur égale à $0.8 \mu\text{m}$ a été simulée avec le modèle viscoélastique non-linéaire d'IMPACT-4 et un modèle visqueux non-linéaire. Ce dernier est obtenu à partir d'IMPACT-4, en fixant le module de rigidité de la silice à une valeur très élevée et en relaxant entièrement les contraintes à chaque pas de temps.

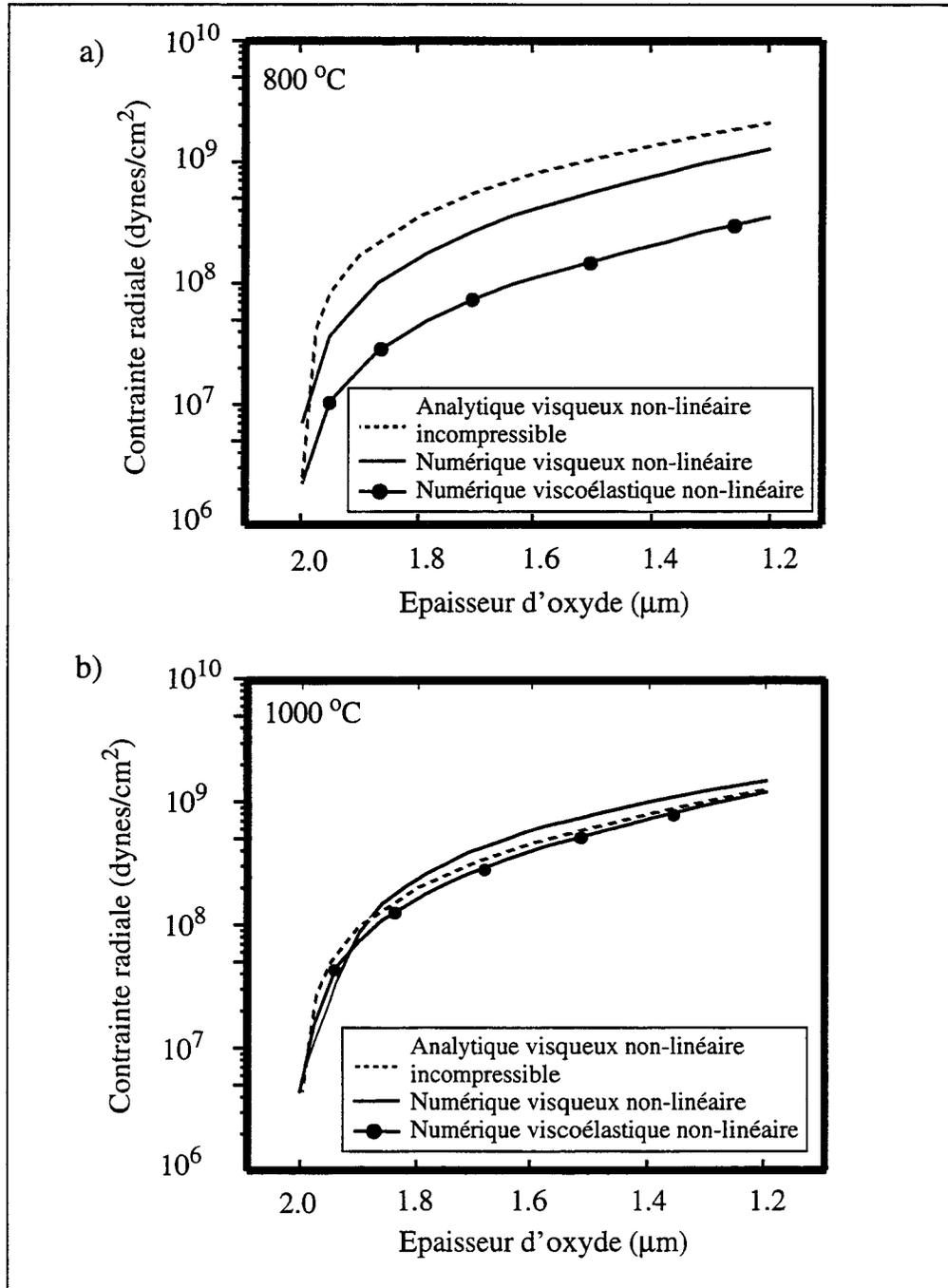


Figure 20 : Contrainte radiale au sein d'un oxyde de silicium, résultat de l'oxydation d'un substrat cylindrique de rayon $1.2 \mu\text{m}$ à: a) 800°C , b) 1000°C . Les résultats numériques proviennent d'IMPACT-4, la solution analytique est de Rafferty [33].

Deux températures d'oxydation ont été investiguées respectivement égales à 800°C et 1000°C. Les épaisseurs finales d'oxyde sont identiques. Les figures 20a et 20b comparent les valeurs de la contrainte radiale pour chaque modèle. La solution analytique calculée par Rafferty [33] est également rapportée. A 1000°C, les trois résultats sont quasiment identiques, alors qu'à la température la plus basse, le désaccord est important, les contraintes calculées par le modèle viscoélastique étant inférieures à celles provenant du calcul visqueux. A 800°C, l'effet de la plasticité n'est pas suffisamment important et le modèle visqueux non-linéaire surestime les contraintes.

REMARQUE : A 800°C, le désaccord qui existe entre la solution numérique visqueuse et le résultat analytique de Rafferty est lié à la condition d'incompressibilité. En effet, les calculs de Rafferty supposent que l'oxyde est incompressible alors que le modèle numérique autorise une modification de volume.

4.2 Application des modèles non-linéaires visqueux et viscoélastiques au procédé LOCOS

La fabrication d'une structure LOCOS a été simulée avec IMPACT-4 dans les cas des modèles non-linéaires visqueux et viscoélastiques (figure 21 a et b). Le procédé comprend le dépôt d'un piédestal d'oxyde d'épaisseur égale à 150 Å et d'une couche de nitrure (0.1 µm). Après oxydation, l'épaisseur de l'oxyde de champ est égale à 0.5 µm.

La déflexion du nitrure est rendue difficile par son épaisseur relativement importante. Par conséquent, le masque de nitrure induit un niveau élevé de contraintes en cisaillement dans la région du bec d'oiseau.

A 1000°C, la faible valeur de la viscosité de l'oxyde minimise les effets des contraintes et du taux de déformation sur le mécanisme de déformation de la structure.

A 800°C, la différence entre les écoulements non-linéaires visqueux et viscoélastiques est mise en évidence. En effet, dans le cas du mode viscoélastique, la forte valeur de la viscosité de l'oxyde se traduit par un temps de relaxation très long et donc une impossibilité de relaxer complètement les contraintes durant l'oxydation, au contraire du modèle visqueux qui relaxe entièrement les contraintes à chaque pas de temps. Dans ce dernier cas, l'effet des contraintes sur la cinétique d'oxydation est minoré et la croissance du bec d'oiseau est plus importante.

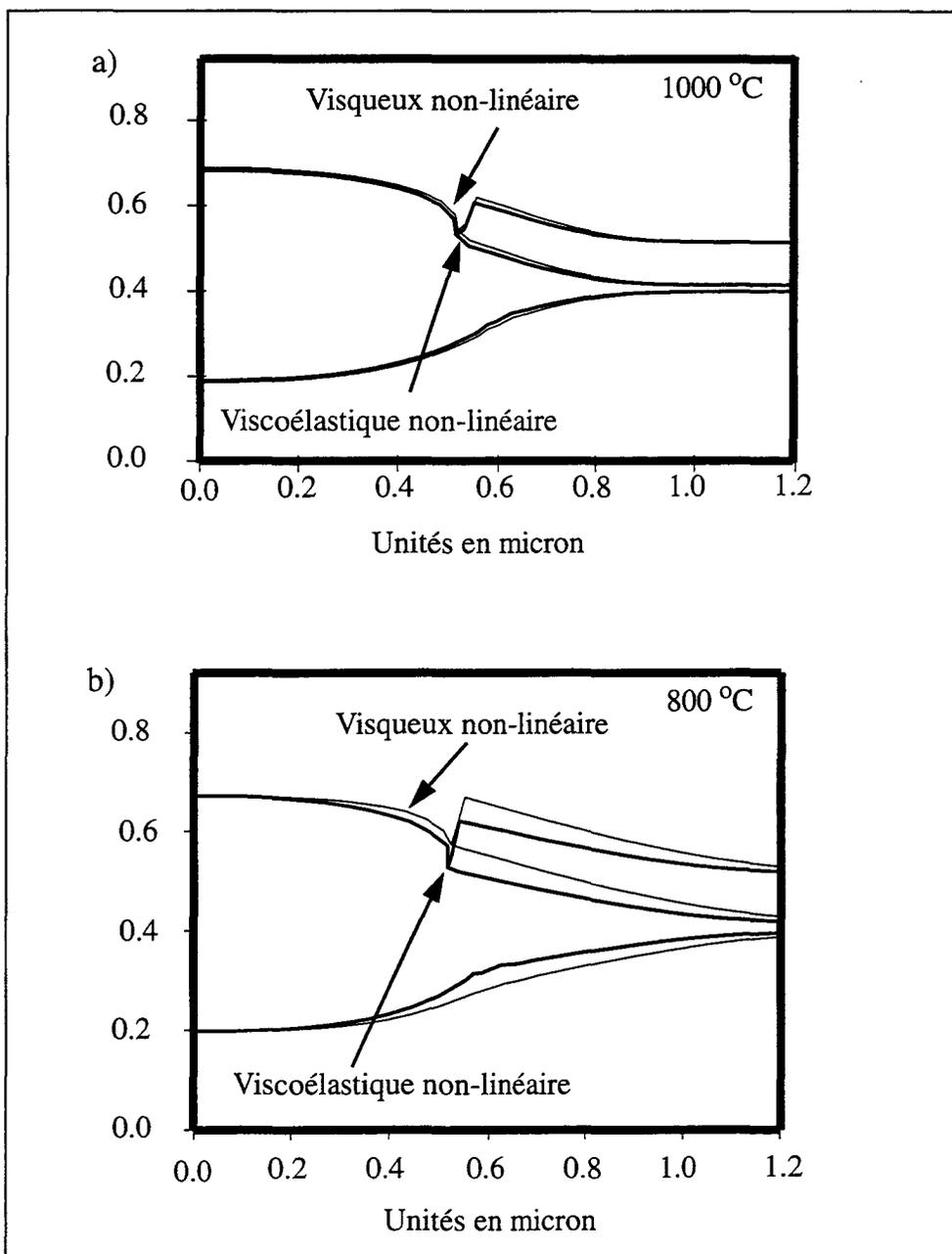


Figure 21 : Formes d'oxyde résultantes de la simulation d'une étape d'oxydation à : a) 1000°C, 1 atm., 100 mn. et b) 800°C, 2.5 atm., 500 mn., en ambiance humide. Les modèles non-linéaires visqueux et viscoélastiques sont comparés pour chaque température.

Pour corroborer ces résultats, la distribution du temps de relaxation (τ_r) à 800°C, en fin d'oxydation, est donnée à la figure 22. On peut s'apercevoir que le modèle visqueux n'est pas adéquat puisque les valeurs de τ_r ne sont pas négligeables face au temps total d'oxydation et ce malgré la réduction locale de la viscosité.

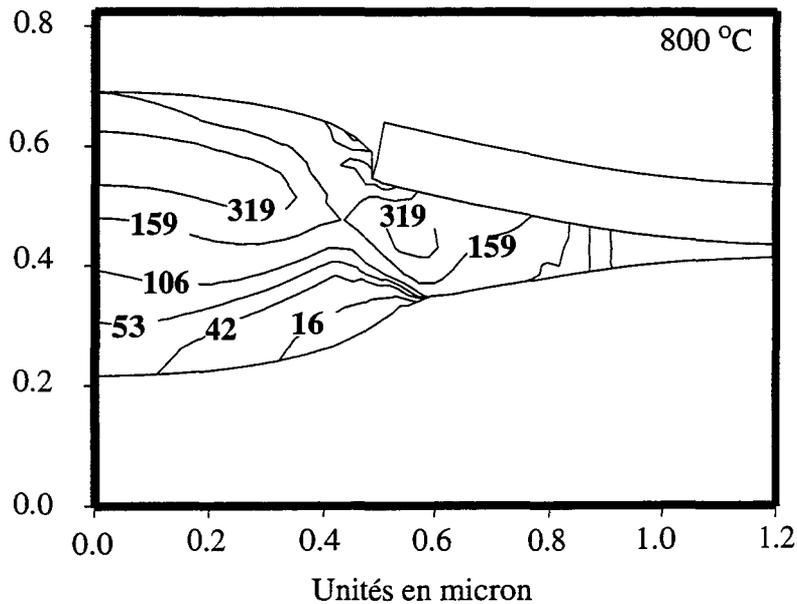


Figure 22 : Distribution du temps de relaxation des contraintes pour la structure LOCOS fabriquée à 800°C avec le modèle viscoélastique non-linéaire. Le temps de relaxation intrinsèque $\tau_r = \eta_0/G$ est égal à 532 minutes.

Ces exemples montrent qu'à basse température d'oxydation, un modèle comportemental visqueux non-linéaire n'est pas équivalent au comportement viscoélastique non-linéaire. En effet, l'importante valeur de la viscosité donne à la silice un caractère plus élastique que visqueux que seule la modélisation viscoélastique peut rendre. Cette conclusion est extensible aux cas des oxydations en ambiance sèche pour lesquelles la viscosité de l'oxyde est plus importante qu'en ambiance humide.

Chapitre 4

Références bibliographiques

- [1] W. R. Run Yan and K. E. Bean, "Semiconductor Integrated Circuit Processing Technology", Addison Wesley Series, (ISBN 0-201-10831-3), 1990.
- [2] J. Vanhellefont, S. Amelinckx and C. Claeys, "Film-Edge-Induced Dislocation Generation in Silicon Substrates", Journal of Applied Physics, vol. 61, p. 2170, 1987.
- [3] P. Ferreira, "Simulation de problèmes mécaniques dans les structures intégrées.", Thèse en préparation à l'IEMN pour une présentation à l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres-Artois.
- [4] D. Chidambarrao, J.P. Peng and G.R. Srinivasan, "Stresses in Silicon Substrates near Isolation Trenches", Journal of Applied Physics, vol. 70, p. 4816, 1991.
- [5] K. Sumino, "Dislocation Behavior and Mechanical Strengths of Float-Zone Silicon Crystals and Czochralski Silicon Crystals", Semiconductor Silicon 1981, The Electrochemical Society, Pennington, NJ, p.208, 1981.
- [6] K. Sumino, I. Yonenaga and M. Imai, "Effects of Nitrogen on Dislocation Behavior and Mechanical Strength in Silicon Crystals", Journal of Applied Physics, vol. 54, p. 5016, 1983.
- [7] I. Yonenaga, K. Sumino and K. Hoshi, "Mechanical Strength of Silicon Crystals as a function of the Oxygen Concentration", Journal of Applied Physics, vol. 56, p. 2346, 1984.
- [8] P.M. Fahey, S.R. Mader, S.R. Stiffler, R.L. Mohler, J.D. Mis and J.A. Slinkman, "Stress-induced Dislocations in Silicon Integrated Circuits", IBM Journal of Research and Development, vol. 36, no. 2, March 1992.

- [9] J. Vanhellemont and C. Claeys, "A Theoretical Study of the Critical Radius of Precipitates and its Application to Silicon Oxide in Silicon", *Journal of Applied Physics*, vol. 62, p. 3960, 1987.
- [10] J. Vanhellemont, H. Bender and C. Claeys, "On the Homogeneous Nucleation of Dislocations During Integrated Circuit Processing", *Institute of Physics Conference series no. 104*, chapitre 5, p. 461, 1989.
- [11] S.M. Hu, "A Method for Finding Critical Stresses of Dislocation Movement", *Applied Physics Letters*, vol. 31, p. 139, 1977.
- [12] C.S. Rafferty, "Simulation of Stress Dependent Isolation," *Proceedings of the 2nd international symposium of process physics and modeling in semi-conductor technology Tech. Dig*, Eds. G.R. Srinivasan, J.D. Plummer and S.T. Pantelides, The Electrochemical Society, Pennington, N.J., U.S.A., 1991.
- [13] V. Senez, D. Collard and B. Baccus, "Quantitative 2D Stress Dependent Oxidation with Viscoélastic Model", *Proceedings of SISDEP'93*, vol. 5, p. 165, September 1993.
- [14] P. Sutardja, W.G. Oldham and D.B. Kao, "Modelling of Stress Effects in Silicon Oxidation including the non-linear Viscosity of Oxide", *Proceedings of the IEDM 87*, p. 264, 1987.
- [15] D. B. Kao, J. P. McVittie, W. D. Nix and K. C. Saraswat, "Two-Dimensional Thermal Oxidation of Silicon-1. Experiments", *IEEE Transaction on Electron Devices*, vol. 34, no. 5, p. 1008, 1987.
- [16] H. Umimoto, S. Odanaka, I. Nakao and H. Esaki, "Numerical Modeling of Nonplanar Oxidation Coupled with Stress Effects", *IEEE Transaction on Computer-Aided-Design*, vol. CAD-8, p. 599, 1989.
- [17] P.B. Griffin and C.S. Rafferty, "A Viscous Nitride Model for Nitride/Oxide Isolation Structures", *Proceedings of the IEDM 90*, p. 741, 1990.
- [18] A. Poncet, "Finite Element Simulation of Local Oxidation", *IEEE Transaction on Computer-Aided-Design*, vol. CAD-4, p. 41, 1985.
- [19] S. Isomae, S. Yamamoto, S. Aoki and A. Yajima, "Oxidation Induced Stress in a LOCOS Structure", *IEEE Electron Device Letter*, vol. EDL-7, p. 368, 1986.
- [20] J.P. Peng and G.R. Srinivasan, "Non-Linear Visco-Elastic Modeling of Thermal Oxidation of SiO₂", *Proceedings of the NASECODE VII*, Eds. J.J.H. Miller, Front Range Press, Boulder, Co., U.S.A., 1991.
- [21] N. Saito, H. Miura, S. Sakata, M. Ikegawa, T. Shimizu and H. Masuda, "A Two-Dimensional Thermal Oxidation Simulator using Visco-Elastic Stress Analysis", *Proceedings of the IEDM 89*, p. 695, 1989.

- [22] B. Coulman, C. Aussems, P.A. Van Den Plas and N. Wils, "LOCOS Isolation for ULSI", Proceedings of the 2nd international symposium on ULSI science and technology, p. 759, 1989.
- [23] D. B. Kao, J. P. McVittie, W. D. Nix and K. C. Saraswat, "Two-Dimensional Thermal Oxidation of Silicon-2. Modeling Stress Effects in Wet Oxides", IEEE Trans. Electron Devices, vol. 35, no. 1, p. 25, 1988.
- [24] P. Ferreira, V. Senez, D. Collard and B. Baccus, "Study of Local Silicon Oxidation with Calibrated Nitride Model", Proceedings of ESSDERC'94, p. 259, 1994.
- [25] N. Guillemot, "A New Analytical Model of the Bird's Beak ", IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-34, no. 5, p. 1033, May 1987.
- [26] E. Bassous, H.N. Yu and V. Maniscalco, "Topology of Silicon Structures with Recessed SiO₂", Journal of the Electrochemical Society, vol. 123, no. 11, p. 1729, 1976.
- [27] P.U. Kenkare, J.R. Pfister, J.D. Hayden, R. Subrahmanyam, R.I. Hegde and V. Kaushik, "Sensitivity of Field Oxidation Profiles to Active Pattern", Proceedings of the IEDM 93, p. 479, 1993.
- [28] V. Senez, D. Collard, B. Baccus, M. Brault and J. Lebailly, "Analysis and Application of a Viscoelastic Model for Silicon Oxidation", Journal of Applied Physics, vol. 76, no. 6, p. 3285, 1994.
- [29] D.K. Brown, S.M. Hu and J.M. Morrissey, Journal of the Electrochemical Society, vol. 129, p. 1084, 1982.
- [30] C.H. Hsueh and A.G. Evans, "Oxidation Induced Stresses and some Effects on the Behavior of Oxide Films", Journal of Applied Physics, vol. 54, no. 11, p. 6672, November 1983.
- [31] S.M. Hu, "Effect of Process Parameters on Stress Development in Two-Dimensional Oxidation", Journal of Applied Physics, vol. 64, no. 1, p. 323, July 1988.
- [32] L.O. Wilson and R.B. Marcus, "Oxidation of Curved Silicon Surfaces", Journal of the Electrochemical Society, vol. 134, no. 2, p. 481, 1987.
- [33] C.S. Rafferty and R.W. Dutton, "Plastic Analysis of Cylinder Oxidation", Applied Physics Letters, vol. 54, p. 1815, 1989.
- [34] B.W. Char, K.O. Geddes, G.H. Gonnet, B.L. Leong, M.B. Monagan and S.M. Watt, "MapleV Reference Manual", Springer-Verlag, 1992.
- [35] B. Baccus, D. Collard, E. Dubois and D. Morel, "IMPACT-4 User's guide", September 1991.

Chapitre 5

pplications

Ce chapitre est dédié à la mise en application du modèle numérique d'oxydation thermique du silicium. Trois aspects différents de l'utilisation de cet outil numérique sont abordés. Le premier traite de l'optimisation géométrique de la structure d'isolation de type LOCOS enterré d'un procédé BICMOS 0.8 μm . Le second s'attache à analyser des dispositifs plus avancés, de types SILO et PBL, et s'intéresse particulièrement aux effets des contraintes mécaniques pour des structures miniaturisées. Enfin, les caractéristiques électriques de deux transistors MOS parasites formés à partir d'oxydes épais de type LOCOS et LOCOS enterré sont simulées. Les résultats obtenus pour chacune de ces trois applications et leur bon accord avec la réalité valident la modélisation rapportée dans ce manuscrit.

1. ETUDE DE L'ISOLATION D'UN PROCEDE BICMOS

Ce paragraphe concerne l'étude de la structure d'isolation de type LOCOS enterré du procédé BICMOS QUBIC1 de PHILIPS. Développée chez Signetics (Ca, USA), et transférée au centre de Caen, cette technologie propose des transistors bipolaires npn à émetteur polycristallin ayant une fréquence de transition de 13 GHz et un procédé CMOS 0.8 μm . Dans ce procédé, 200 paramètres de fabrication

peuvent influencer les caractéristiques des composants, parmi ceux-ci, trente environ sont critiques, agissant notamment sur les caractéristiques de l'isolation.

Le procédé d'isolation standard comprend la croissance thermique en ambiance sèche d'un piédestal d'oxyde de 20 nm, le dépôt d'une couche de nitrure d'épaisseur égale à 120 nm suivi d'une gravure de type anisotropique du bicouche oxyde/nitrure afin de réaliser l'ouverture du masque nécessaire à l'oxydation de champ. Une gravure chimique du substrat de silicium permet d'enterrer profondément l'oxyde épais. Celle-ci possède une profondeur de 580 nm et son extension sous le masque est égale à environ 350 nm. L'oxydation thermique de champ est effectuée en ambiance humide à 1000°C pendant 405 minutes. L'épaisseur moyenne de l'oxyde est égale à 1.2 μm .

L'étude s'attache à mettre en évidence les influences des paramètres géométriques de la structure initiale sur la forme de l'oxyde final. Le modèle incomplet a été mis en oeuvre pour cette analyse, en utilisant les résultats de la calibration présentés au chapitre précédent. Une première partie montre l'influence de l'étape de gravure du silicium sur la forme et le niveau de contraintes de l'oxyde. L'analyse est effectuée en deux temps. Premièrement, une étude qualitative détermine les paramètres géométriques de la gravure jouant un rôle important dans la forme finale de l'oxyde. Dans un second temps, une étude quantitative est menée qui permet de définir le meilleur compromis minimisant les contraintes mécaniques induites par l'oxydation et générant un bec d'oiseau réduit. La section 2 étudie le comportement de la structure lorsque l'on réduit ses dimensions latérales (longueurs de l'ouverture du nitrure et du masque). Enfin, une comparaison de ce dispositif avec la structure LOCOS correspondante (c'est à dire sans la gravure du silicium) est exposée.

1.1 Influence de la gravure du silicium : étude qualitative

Dans un premier temps, nous avons défini qualitativement les paramètres géométriques de la gravures susceptibles d'entraîner des modifications importantes de la forme de l'oxyde. Les capacités de calculs de topologie implantées dans IMPACT-4 permettent de simuler analytiquement différents types de gravure (sèche, chimique et par bombardement ionique (RIE) [1]) avec plusieurs combinaisons de modèles de base (anisotropique, isotropique et angulaire). Ainsi, l'extension de la gravure sous le masque, sa profondeur et la forme de la pente sous le masque ont successivement été investiguées (figure 1).

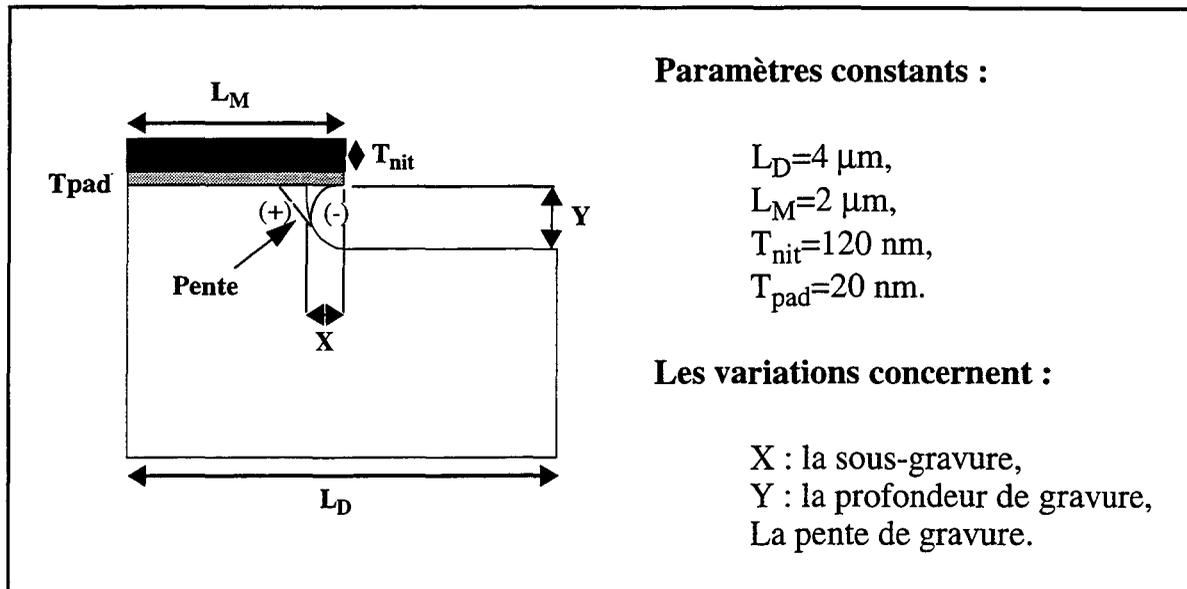


Figure 1 : Définition des paramètres géométriques de la structure.

1.1.1 Extension de la gravure sous le masque

La figure 2 présente les structures initiales et finales de l'isolation pour cinq valeurs de la sous gravure, respectivement : 67, 212, 357, 502 et 647 nm.

La superposition des profils finaux pour les deux valeurs extrêmes de la sous gravure et la valeur centrale (figure 3) permet de conclure que 1) la déflexion du nitrure augmente quasi-linéairement avec l'augmentation de la sous-gravure et 2) pour des valeurs extrêmes de ce paramètre, la longueur du bec d'oiseau a tendance à s'agrandir. Cependant, l'analyse des profils initiaux montre que plus la sous gravure est importante plus le rayon de courbure du coin concave du substrat est grand. L'accroissement de ce rayon de courbure diminue les contraintes générées par l'oxydation et donc favorise le développement du bec d'oiseau. Ceci est vérifié par le pincement présent à la base de la "tête d'oiseau" (figure 3) qui s'adoucit au fur et à mesure que la sous gravure augmente.

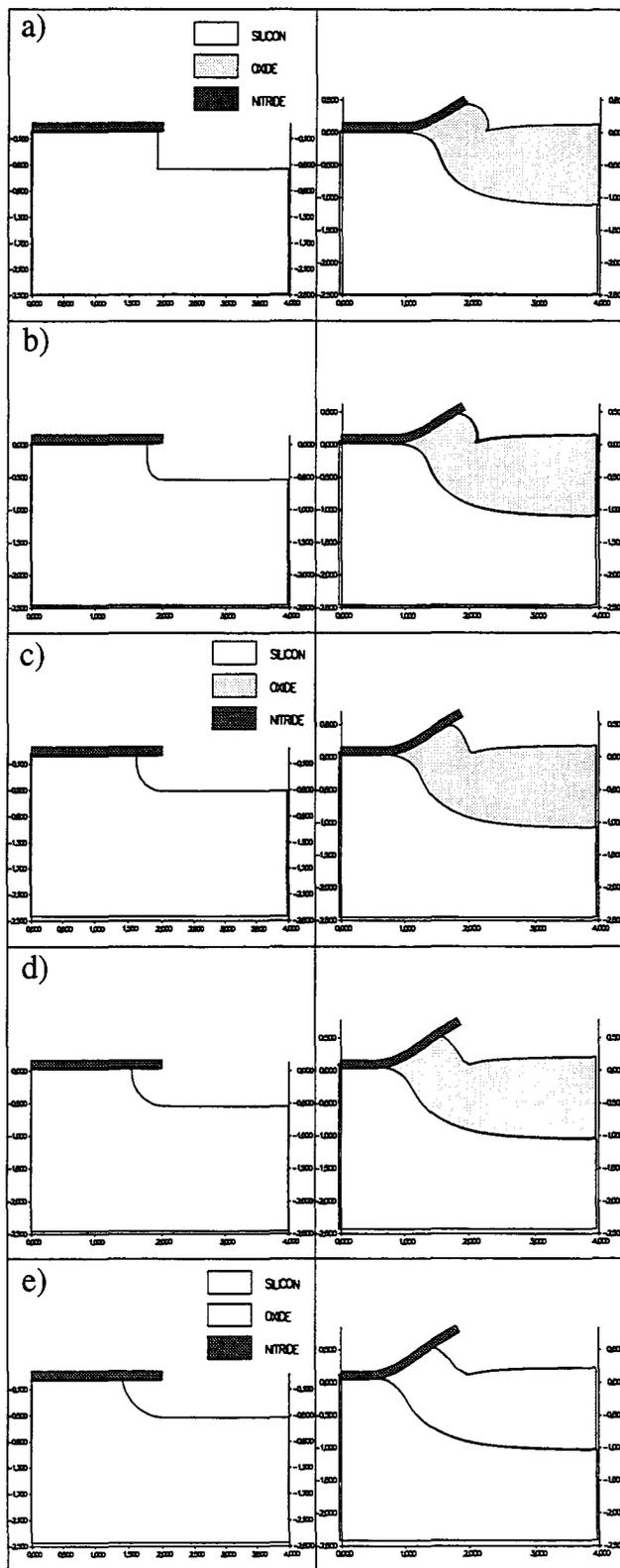


Figure 2 : Comparaison des structures initiales et après oxydation du LOCOS enterré pour cinq valeurs différentes de la sous-gravure : a) 67, b) 212, c) 357, d) 502, e) 647 nm.

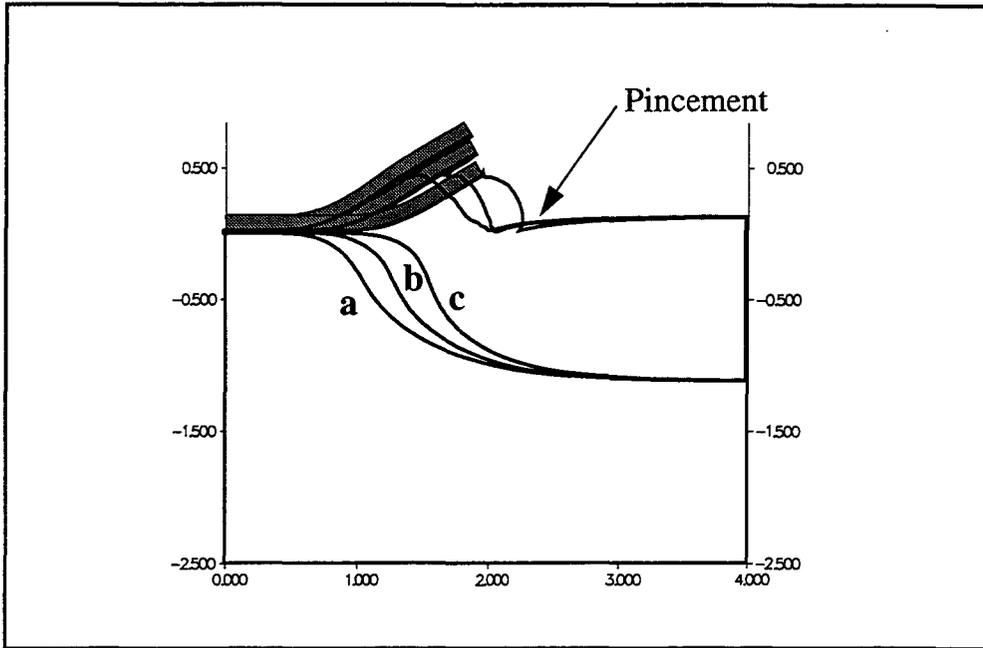


Figure 3 : Superposition des profils d'oxyde du LOCOS enterré pour des sous gravures égales à : a) 647, b) 357 et c) 67 nm.

Pour pouvoir étudier l'effet de la sous gravure sur la forme d'oxyde, il est nécessaire de maintenir constant le rayon de courbure du coin concave du substrat.

1.1.2 Profondeur de la gravure

Trois profondeurs différentes ont été investiguées : 435, 580 et 725 nm. Les résultats sont exposés à la figure 4.

La superposition des profils finaux (figure 5) met en évidence la diminution de la hauteur de la "tête d'oiseau" lorsque la profondeur est réduite. Par contre, la déflexion du nitrure reste constante. L'examen des profils de gravure assure que seule la profondeur a été modifiée, le rayon de courbure du coin concave étant maintenu constant.

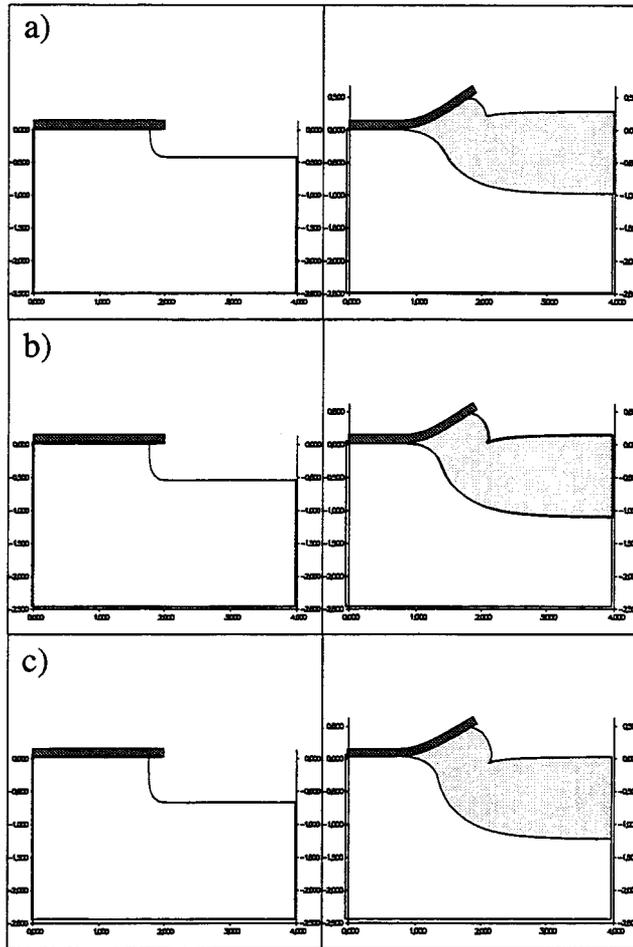


Figure 4 : Comparaison des structures initiales et après oxydation du LOCOS enterré pour trois valeurs différentes de la profondeur de gravure : a) 435 , b) 580 et c) 725 nm.

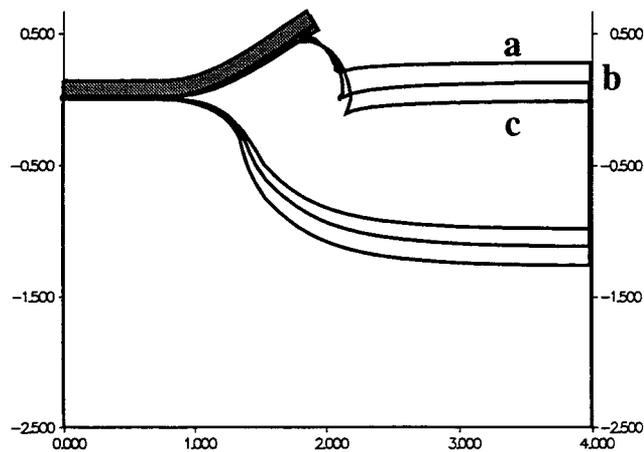


Figure 5 : Superposition des profils d'oxyde du LOCOS enterré pour les profondeurs de gravure égales à : a) 435 , b) 580 et c) 725 nm.

1.1.3 Forme de la gravure sous le masque

Trois configurations sont étudiées : une pente positive (figure 6a), à 90° (figure 6b) et négative (figure 6c).

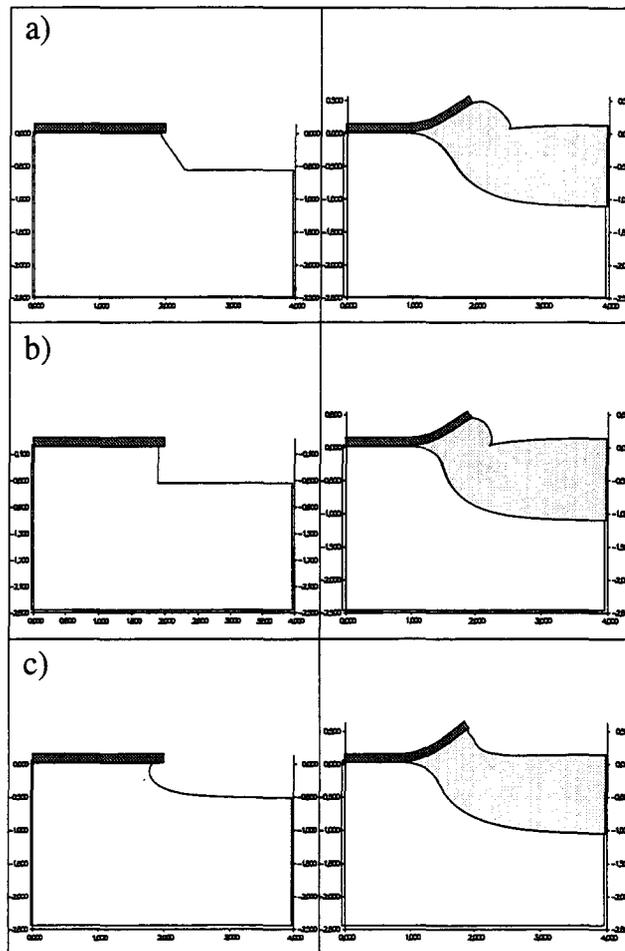


Figure 6 : Comparaison des structures initiales et après oxydation du LOCOS enterré pour trois formes différentes de gravure sous le masque.

On s'aperçoit que la pente sous la gravure a un impact majeur sur la forme final du bec d'oiseau. Cependant, d'autres paramètres doivent être considérés pour justifier les résultats de la figure 6. En effet, on peut observer que la valeur du rayon de courbure du coin concave et sa position sont très différentes d'une simulation à l'autre. Il est quasiment nul et situé à l'extrémité du masque dans le cas d'une pente à

90°. Il augmente très fortement pour les deux autres cas, positionné à l'extérieur du masque pour la pente positive, sous le masque pour la pente négative. De plus, pour ces deux derniers cas, la diminution de la profondeur de gravure dans le voisinage du bord du masque est une cause supplémentaire permettant d'expliquer les disparités de formes que l'on obtient.

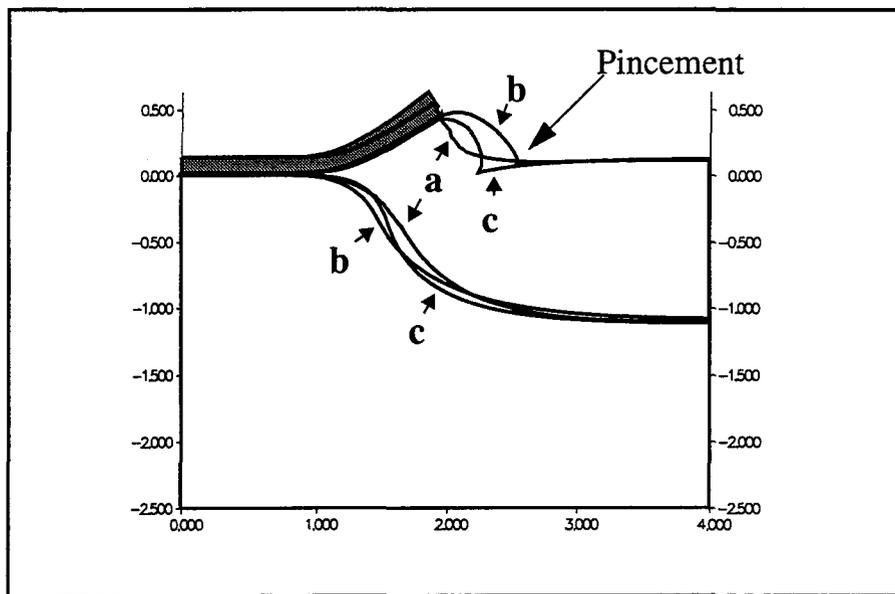


Figure 7 : Superposition des profils d'oxyde du LOCOS enterré pour les trois formes de gravure définies à la figure 6.

La superposition des résultats après oxydation montre que la pente positive génère le bec d'oiseau le plus important. Au contraire, la pente négative crée une zone de transition réduite et supprime le pincement précédemment obtenu à la base de la tête d'oiseau.

En conclusion, on s'aperçoit de la nécessité absolue de connaître parfaitement la forme de la gravure du silicium pour pouvoir simuler avec exactitude la formation de l'oxyde de champ enterré. La photographie SEM donnée à la figure 8 correspond à la gravure de l'isolation du procédé QUBIC1. Il s'agit d'un cas de pente négative. A partir de ce profil réaliste, la simulation de l'étape d'oxydation avec le modèle incomplet aboutit au résultat de la figure 9a, en excellent accord avec l'expérience (figure 9b).

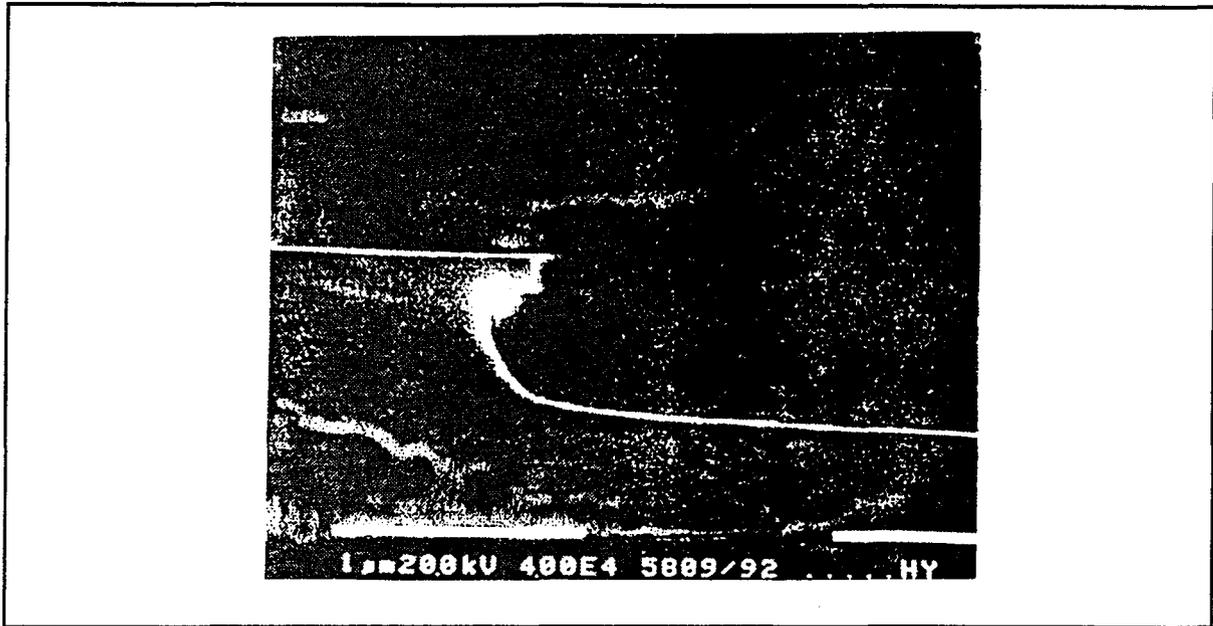


Figure 8 : Photographie SEM de la gravure du silicium pour la structure d'isolation du procédé QUBIC1 [8].

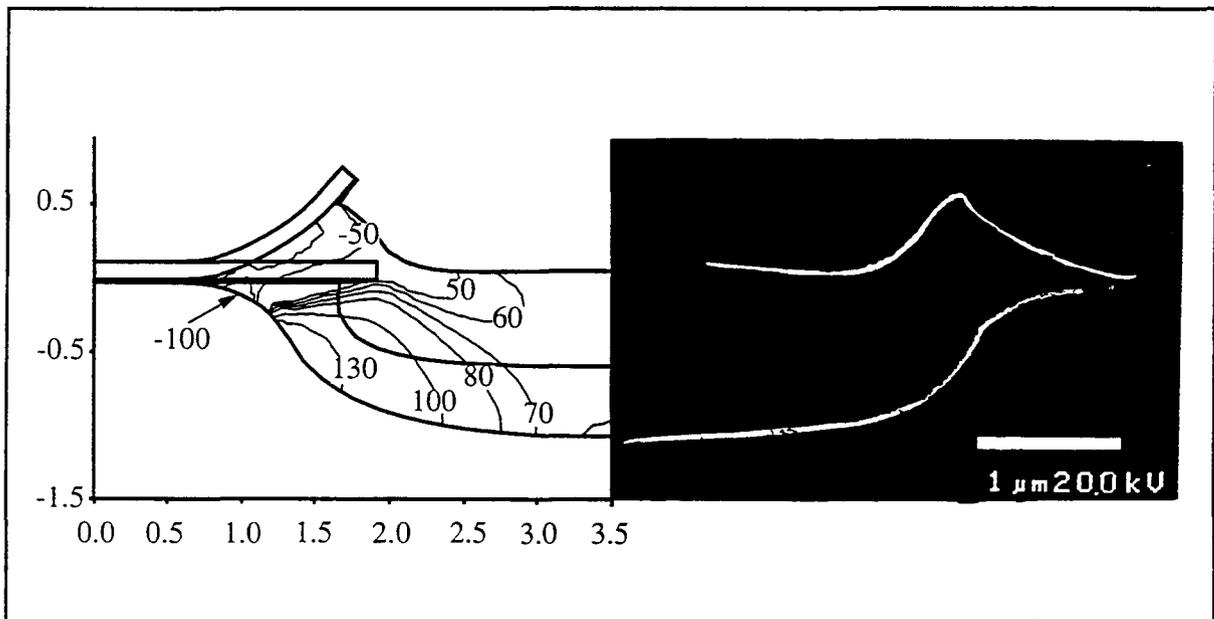


Figure 9 : Structure LOCOS enterrée : a) résultat de la simulation, le profil de la structure initiale est donné en sur-impression. Le profil de contraintes correspond aux contraintes de cisaillement dans le plan cristallin (111) du silicium (unités en MPa), b) photographie SEM correspondante [8].

Puisque l'apparition de dislocations dans le silicium dépend en partie de l'amplitude des contraintes de cisaillement appliquées sur les plans les plus fragiles du substrat (plans (111) et $(\bar{1}\bar{1}1)$), la distribution de ces contraintes calculées dans le plan (111) est donnée pour la silice (figure 9a). Les maximums de ce champ de contraintes permettent de localiser les faiblesses de la structure.

1.2 Influence de la gravure du silicium : étude quantitative [2]

Afin de pouvoir décorréler les effets des différents paramètres de la gravure, une forme simplifiée de la structure initiale a été définie analytiquement qui dépend de 1) l'extension de la gravure sous le masque de nitrure, 2) sa profondeur, 3) la pente du bord de gravure et 4) le rayon de courbure du coin concave (figure 10).

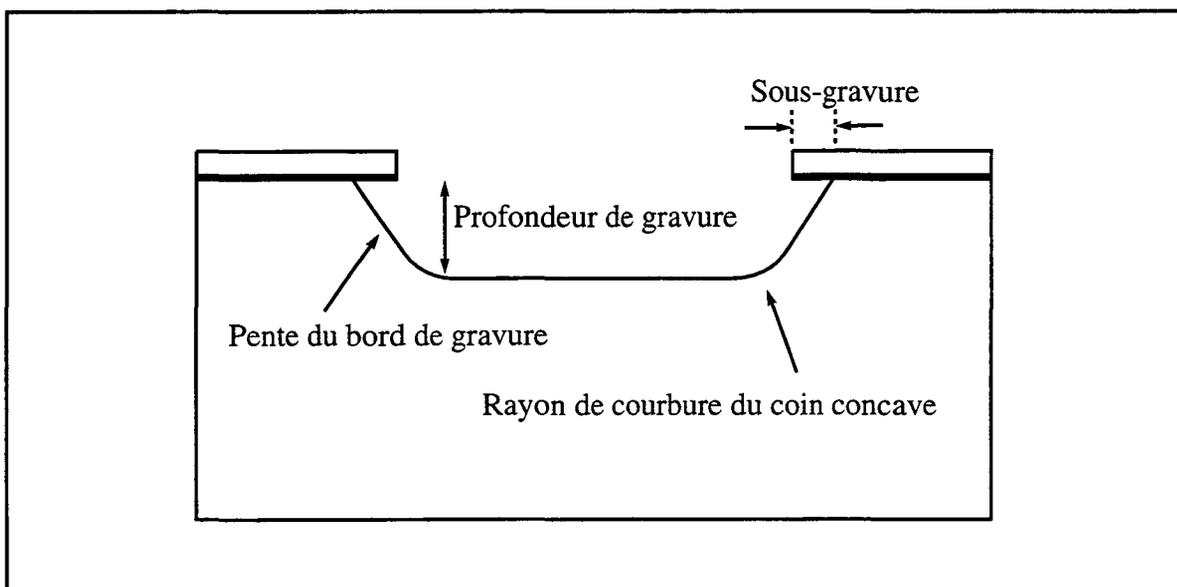


Figure 10 : Représentation schématique de la gravure du silicium.

L'impact de ces paramètres sur la forme de l'oxyde est quantifié par les variations enregistrées sur 1) la longueur du bec d'oiseau (B1), 2) la longueur de la zone de transition sous le nitrure (B2), 3) la hauteur de la tête d'oiseau (H1), 4) la planarité de la structure (H2) et 5) la déflexion du nitrure (H3), paramètres géométriques

de l'oxyde enterré définis par Bassous [3]. Les effets sur le niveau des contraintes mécaniques sont mesurés non-seulement en termes de maximums, mais également en termes d'expansion spatiale ou d'énergie.

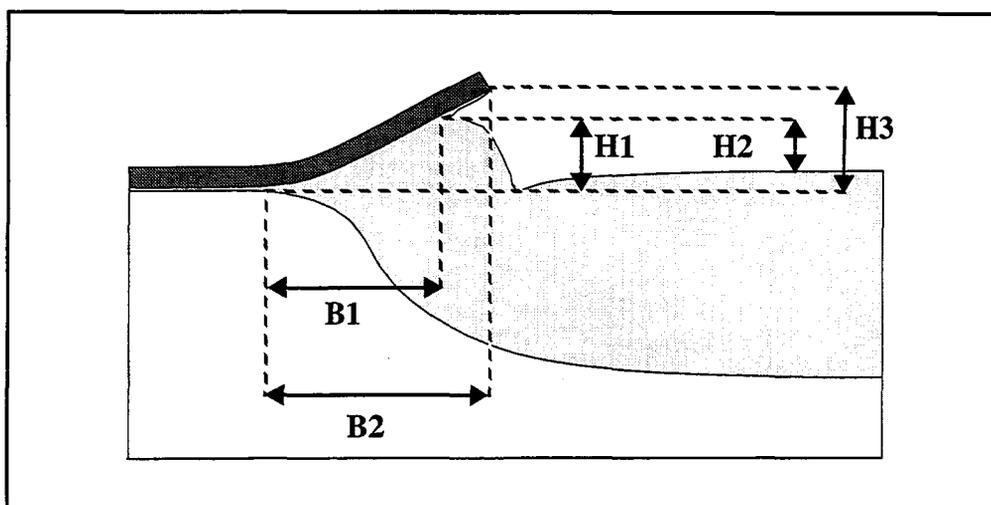


Figure 11 : Définition des paramètres géométriques du LOCOS enterré.

1.2.1 Extension de la gravure sous le masque

Premièrement, l'influence de l'extension de la gravure sous le silicium est investiguée avec des sous-gravures comprises entre 5 et 580 nm. L'analyse des caractéristiques géométriques (figure 12), exprimées en fonctions des paramètres B^* et H^* , révèle que plus la sous gravure est importante plus la déflexion du nitrure (caractérisée par $H3$), la longueur de la zone de transition ($B2$) et la longueur du bec d'oiseau ($B1$) augmentent.

Au contraire, cette variation n'a aucun effet sur la planarité de la structure ($H2$) et la hauteur de la tête d'oiseau ($H1$). L'augmentation quasi-linéaire de la déflexion du nitrure montre qu'accroître la sous-gravure revient à translater la structure d'isolation sous la couche de nitrure. La légère augmentation de la longueur du bec d'oiseau pour les sous-gravures importantes traduit la montée du niveau de contraintes dans l'oxyde, provoquée par la déflexion plus importante du nitrure et facilitant l'écoulement visqueux en direction du centre de la structure.

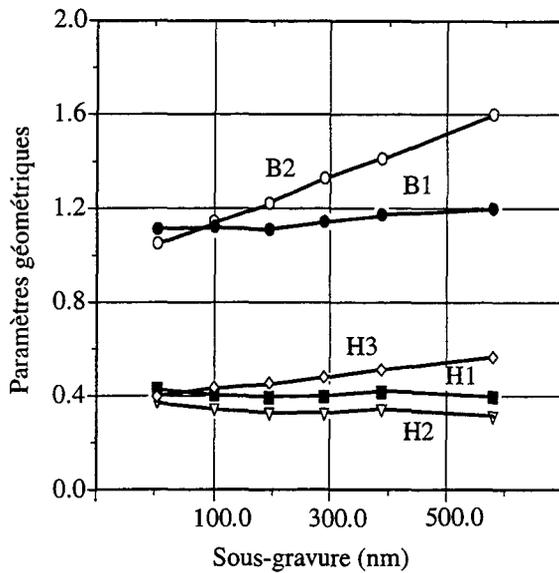


Figure 12 : Variations des paramètres géométriques de l'oxyde enterré en fonction de la longueur de la sous-gravure. La profondeur de la gravure, la pente et le rayon de courbure sont respectivement égaux à 580 nm, 90° et 290 nm.

1.2.2 Profondeur de la gravure

La seconde étude en variation concerne la profondeur de la gravure. Six valeurs ont été simulées : 300, 435, 494, 580, 667 et 725 nm. Dans une structure LOCOS enterrée, le maximum de contraintes mécaniques dans la silice est localisé près du coin concave du substrat. Par conséquent, lorsque l'oxyde de champ est enterré plus profondément, la zone à haut niveau de contraintes se retrouve éloignée de la région du bec d'oiseau. La cinétique d'oxydation sous le masque de nitrure est donc moins affectée par les effets des contraintes. Ceci conduit à des longueurs du bec d'oiseau (B1) et de la zone de transition sous le nitrure (B2) plus importantes et à une détérioration de la planarité (H2) (figure 13). Par contre, aucun effet significatif n'est à noter sur la hauteur de la tête d'oiseau et la déflexion du nitrure.

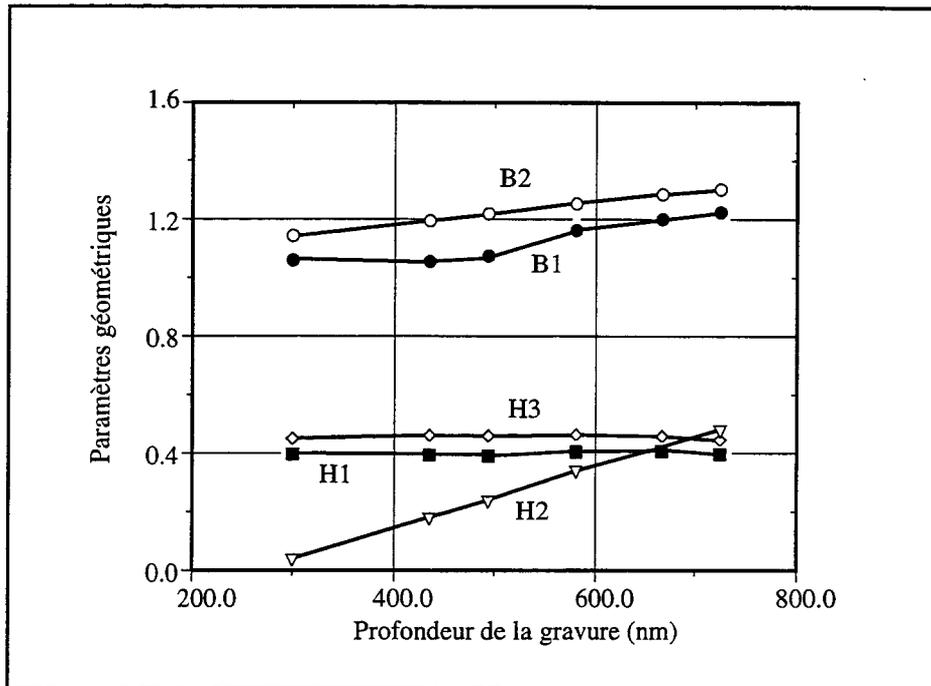


Figure 13 : Variations des paramètres géométriques de l'oxyde enterré en fonction de la profondeur de la gravure. La sous-gravure, la pente et le rayon de courbure sont respectivement égaux à 212 nm, 90° et 290 nm.

1.2.3 Pente de la gravure

Les influences de la pente en bord de gravure ont ensuite été étudiées pour des valeurs de la sous-gravure et de la profondeur de la tranchée constantes, respectivement égales à 212 et 580 nm. Deux configurations extrêmes sont montrées (figures 14 et 15) pour des pentes respectivement égales à 90° et 30°. La structure initiale possède une influence considérable sur la forme finale de l'oxyde comme nous l'avons mentionné lors de l'étude qualitative.

L'explication est fournie par l'analyse des contraintes mécaniques. Plus la pente est importante, plus les contraintes générées dans le voisinage du bec d'oiseau sont importantes. Ceci est en accord avec les observations expérimentales qui notent l'apparition de défauts cristallins dans le silicium pour des pentes supérieures à 75° [4]. Au contraire, pour des angles petits, le développement du bec d'oiseau est important (figure 15).

Cependant, il est surprenant d'observer un phénomène d'amincissement de l'oxyde. Celui-ci résulte de la diminution de l'ouverture effective du masque (caractérisée par une profondeur de gravure maximale) engendrée par le profil peu abrupt de la gravure. Cet amincissement traduit l'extension du champ de contraintes vers le centre de la structure. La pente de la gravure a donc une influence directe sur le potentiel d'intégration de la structure d'isolation.

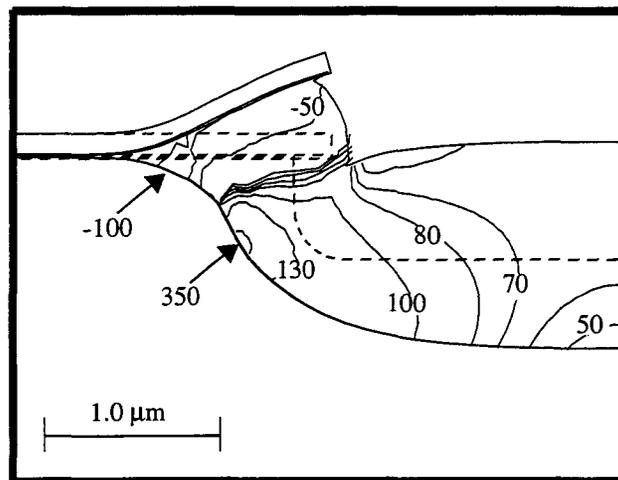


Figure 14 : Gravure initiale du substrat de silicium (pointillé) et résultat de la simulation après oxydation à 1000°C, 1 atm., 405 minutes, en ambiance humide. Les sous-gravure, profondeur de gravure, et rayon de courbure du coin concave sont respectivement égaux à: 212nm, 580nm et 290 nm. La pente en bord de gravure vaut 90°. La distribution de la pression hydrostatique est donnée en MPa.

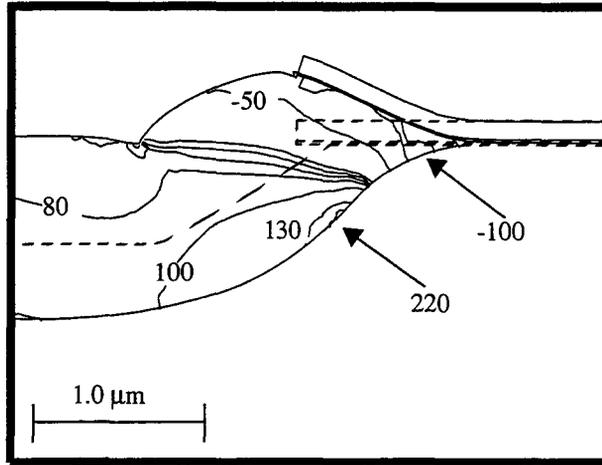


Figure 15 : Gravure initiale du substrat de silicium (pointillé) et résultat de la simulation après oxydation à 1000°C, 1 atm., 405 minutes, en ambiance humide. Les sous-gravure, profondeur de gravure, et rayon de courbure du coin concave sont respectivement égaux à: 212nm, 580nm et 290 nm. La pente en bord de gravure vaut 30°. La distribution de la pression hydrostatique est donnée en MPa.

La figure 16 rapporte les variations du maximum de la pression hydrostatique dans la silice et de l'épaisseur de l'oxyde au centre de la structure en fonction de la pente de la gravure. On s'aperçoit qu'il existe un bon compromis pour une valeur de la pente d'environ 70°.

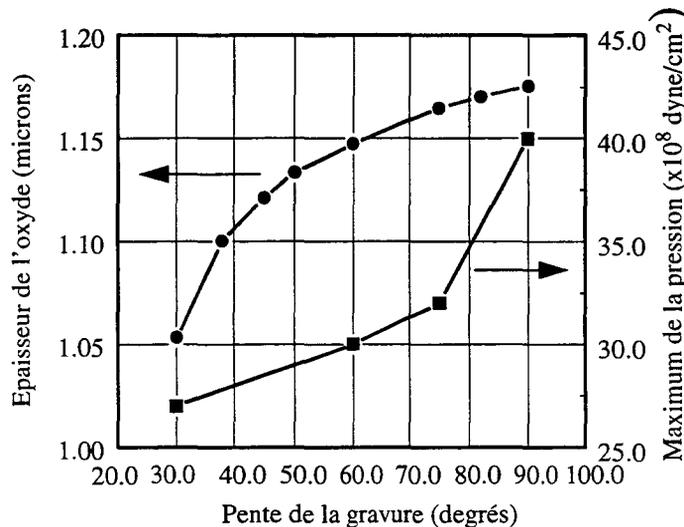


Figure 16 : Variation de l'épaisseur d'oxyde au centre de la structure et du maximum de pression hydrostatique en fonction de la pente de la gravure.

1.2.4 Rayon de courbure de l'angle concave de la gravure

Finalement, l'étude se focalise sur l'influence du rayon de courbure du coin concave. Deux cas extrêmes ont été simulés qui correspondent à des rayons de courbures égaux à 520 et 20 nm (figures 17a et 17b). L'influence de ce paramètre sur la forme finale de l'oxyde, exprimée en fonction des variations des paramètres B^* et H^* , est insignifiante. Mais, l'extension spatiale des contraintes les plus élevées, enregistrée au début de la cinétique pour les rayons de courbure les plus petits est inacceptable, comme le révèle le pincement important de l'oxyde (figure 17b). Au regard des formes de la gravure initiale, on constate que l'effet du rayon de courbure du coin concave est difficilement décorréable de celui de la pente de la gravure.

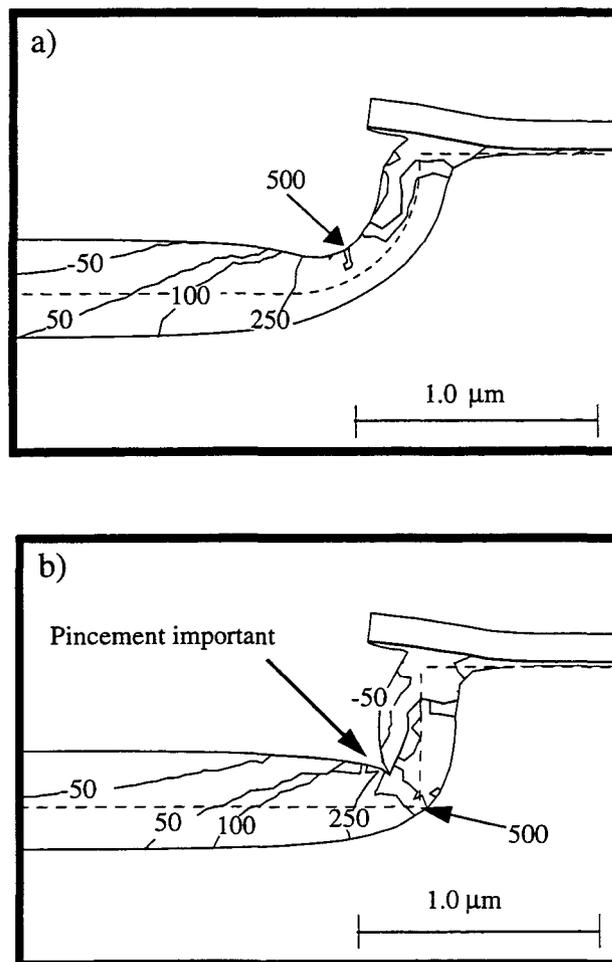


Figure 17 : Gravure initiale du substrat de silicium (pointillé) et résultat de la simulation après oxydation à 1000°C, 1 atm., 60 minutes, en ambiance humide. Les sous-gravures, profondeurs de gravure, et pentes de la gravure sont respectivement égales à : 212nm, 580nm et 90°. Le rayon de courbure du coin concave vaut a) 520 nm, b) 20 nm. La distribution de la pression hydrostatique est donnée en MPa.

En conclusion, la figure 18 résume les avantages et inconvénients des différentes configurations possibles de la gravure du substrat de silicium. Etant donné la dualité qui existe entre le niveau de contraintes mécaniques présent dans l'oxyde et la valeur des caractéristiques géométriques de celui-ci, il est nécessaire de trouver un compromis. La configuration optimale doit minimiser le rayon de courbure du coin concave, assurer une pente positive sous le masque et éviter une diminution de la profondeur de gravure au voisinage externe du masque.

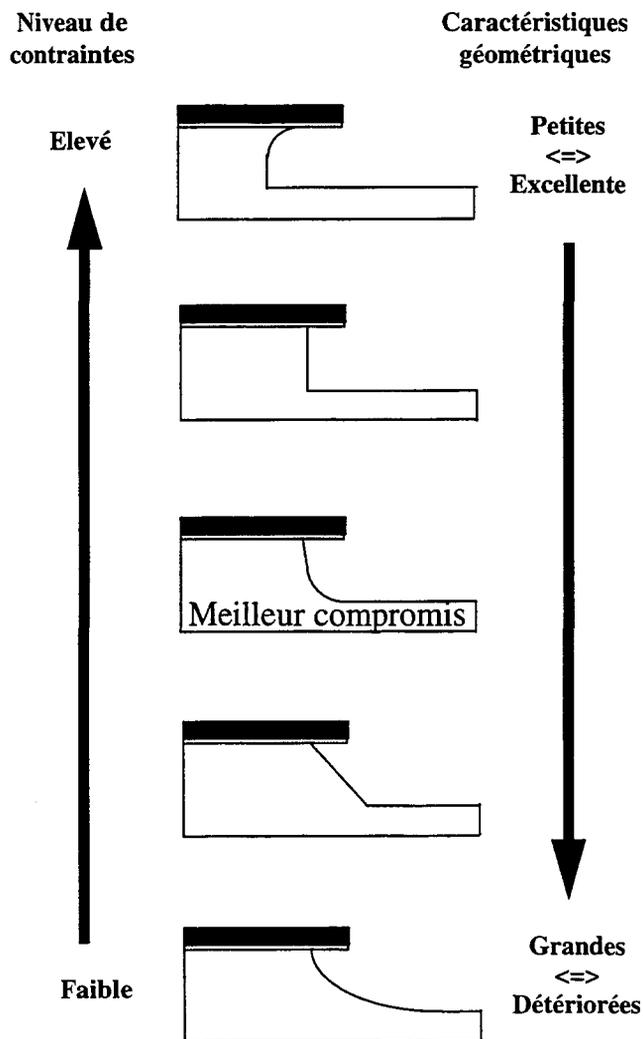


Figure 18 : Avantages et inconvénients des différentes configurations possibles de la gravure du silicium.

1.3 Comportement de la structure avec des dimensions réduites

Cette section étudie le comportement de la structure LOCOS enterré lors de sa miniaturisation. Deux variations sont étudiées : l'une concerne les modifications de la forme d'oxyde lorsque l'on réduit l'ouverture du masque de nitrure, l'autre étudie l'efficacité du masquage lorsque la longueur du bicouche oxyde/nitrure est diminuée.

1.3.1 Amincissement de l'oxyde aux faibles ouvertures du masque

L'étape d'oxydation de deux structures enterrées, qui diffèrent par la forme de la gravure initiale du silicium, a été simulée dans les conditions nominales du procédé QUBIC1. La gravure, désignée comme type 1, est proche de la réalité (SEM de la figure 8), l'autre, appelée type 2, est purement isotropique. Pour tous les résultats présentés, la longueur du masque est gardée constante.

L'étude porte sur l'amincissement de l'oxyde de champ obtenu pour des ouvertures étroites du masque. Ce phénomène a été initialement justifié par une réduction du flux d'agents oxydants à l'interface SiO_2/gaz ambiant [5].

Des études ultérieures ont prouvé que c'est l'augmentation du niveau des contraintes mécaniques en compression dans la silice qui est à l'origine de ce phénomène [6]. La figure 19 compare les distributions spatiales de la pression hydrostatique pour deux structures extrêmes. On constate effectivement une extension de la zone de forte compression vers le centre de la structure pour l'ouverture la plus étroite.

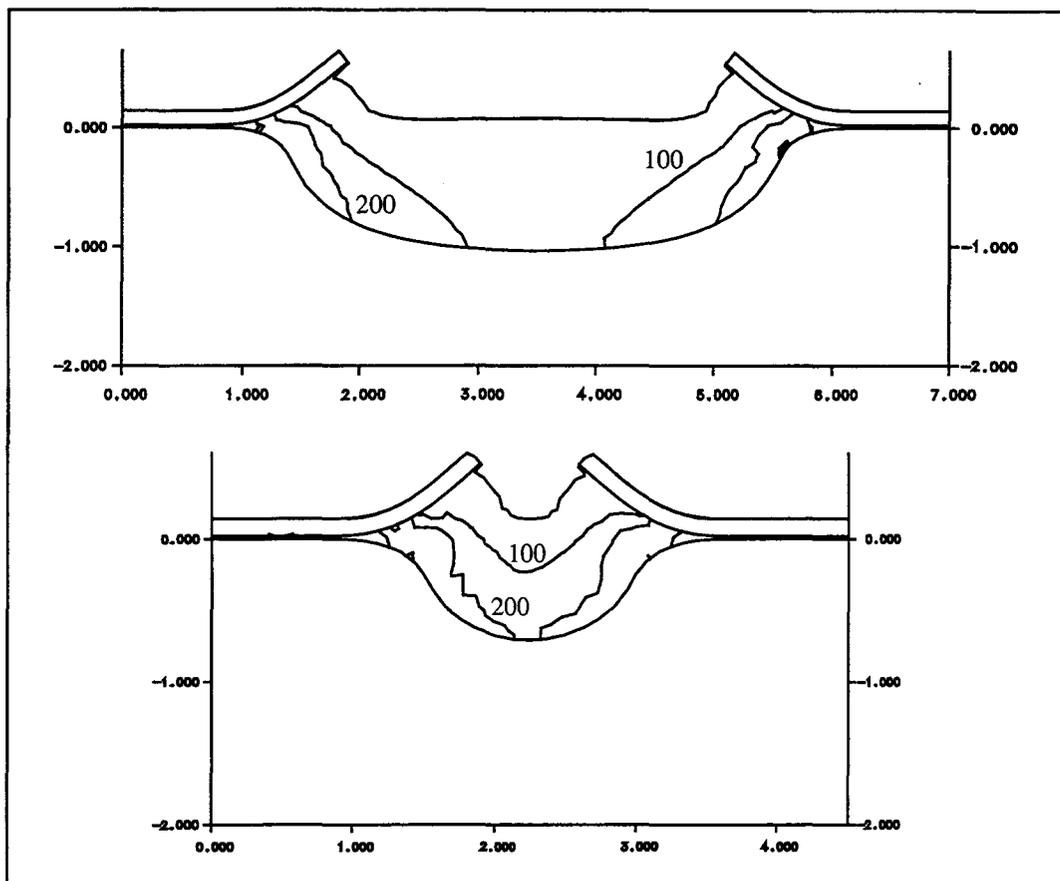


Figure 19 : Comparaison des distributions spatiales de la pression hydrostatique dans l'oxyde après 405 minutes d'oxydation en ambiance humide à 1000°C : a) ouverture du masque égale à 3 μm , b) ouverture égale à 0.5 μm (Unités en MPa).

La figure 20 donne l'évolution de l'épaisseur de l'oxyde au centre de la structure, normalisée par rapport à l'épaisseur maximale, en fonction de l'ouverture du masque. Trois cas sont rapportés :

Premièrement, pour le cas standard (405 minutes, gravure de type1), l'amincissement d'oxyde devient significatif à partir d'une ouverture inférieure à 5 μm . Il atteint 70% de l'épaisseur maximale pour une ouverture de 0.8 μm . C'est ce critère qui est invoqué par Hui [4] pour définir la longueur minimale d'un procédé d'isolation.

Deuxièmement, on étudie le phénomène d'amincissement dans la structure de type 2, purement isotropique (figure 20). On s'aperçoit que le type2 est moins sensible au phénomène d'amincissement que la gravure proche de la réalité (type1).

Ceci indique que le type2 génère un niveau de contraintes plus faible au centre de la structure. En effet, pour de faibles ouvertures, la forme réelle de la gravure ne présente pas de partie plane (figure 22). Ceci conduit donc à des conditions d'oxydation non-planes générant un niveau de contraintes supérieur.

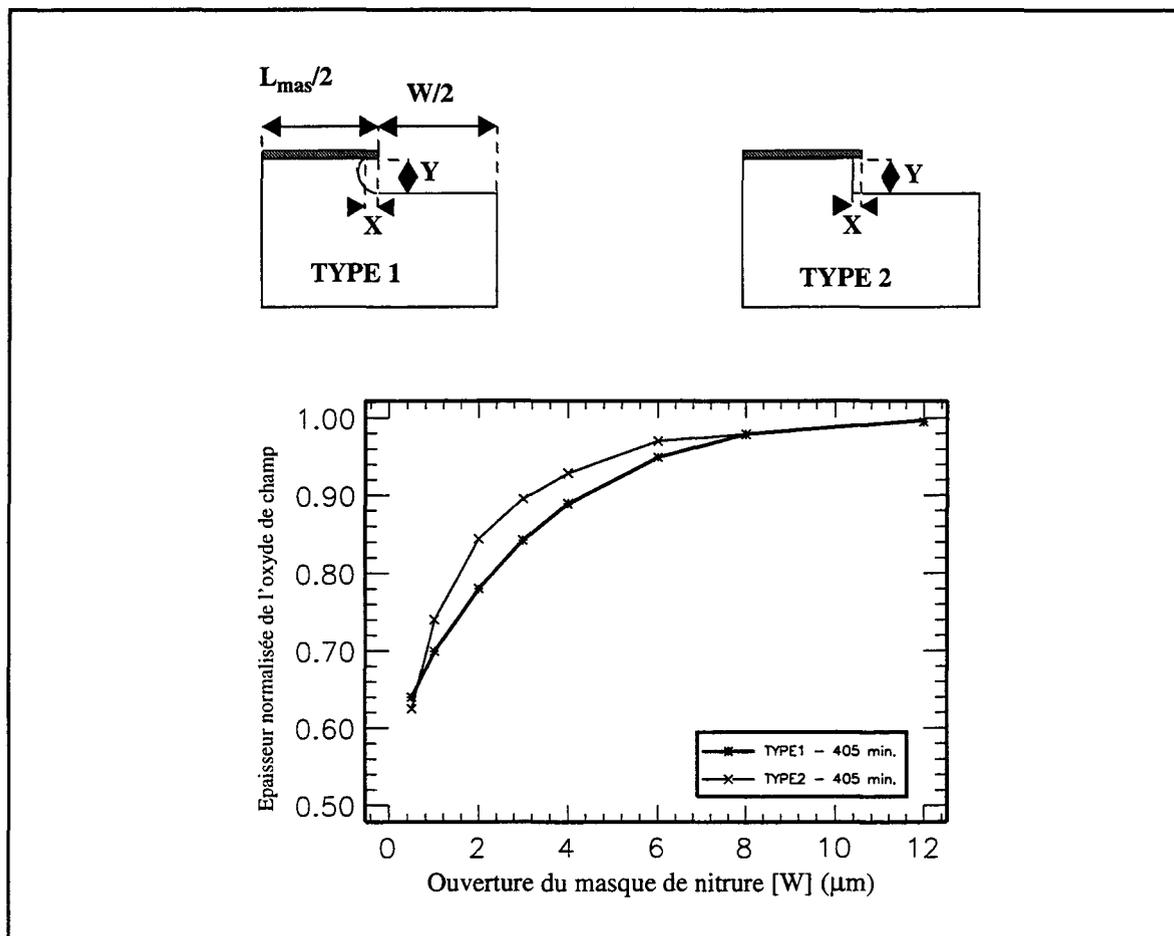


Figure 20 : Variations de l'épaisseur d'oxyde normalisée en fonction de l'ouverture du masque de nitrure (W). TYPE 1 : $X = 0.245 \mu\text{m}$, $L_{\text{mas}} = 4 \mu\text{m}$, $Y_{\text{max}} = 0.58 \mu\text{m}$ (figure 22). TYPE 2 : $X = 0.18 \mu\text{m}$, $L_{\text{mas}} = 4 \mu\text{m}$, $Y = 0.58 \mu\text{m}$.

Enfin, le phénomène d'amincissement est également investigué pour un temps d'oxydation plus court, égal à 160 minutes ($0.77 \mu\text{m}$). Par comparaison avec la simulation de référence (figure 21), on observe que pour un temps d'oxydation plus court, jusqu'à des valeurs intermédiaires de l'ouverture ($>2.2 \mu\text{m}$), le phénomène

d'amincissement est moins prononcé que pour l'oxydation longue (405 minutes). La raison essentielle provient de la déflexion du nitrure qui est moins importante pour des temps d'oxydation courts et donc induit un niveau de contraintes moins élevé dans la silice. En dessous de $2.2 \mu\text{m}$, le résultat s'inverse. En effet, pour des ouvertures étroites, l'amincissement provient non-seulement des contraintes induites par la déflexion du nitrure mais encore de celles issues de la non-planarité de l'interface Si/SiO₂. Cependant, au fur et à mesure de l'avancement de l'oxydation, cette non-planarité de l'interface s'adoucit et l'amincissement devient moins prononcé. L'ouverture minimale, correspondant à 70% de l'épaisseur 1D d'oxyde, est atteinte à $1.7 \mu\text{m}$.

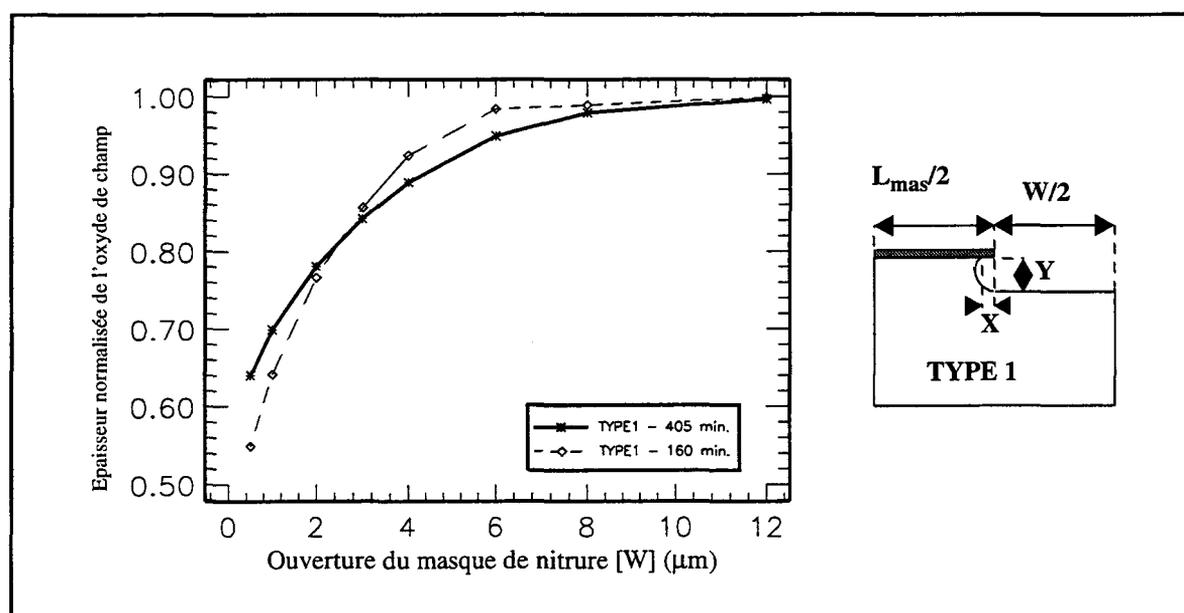


Figure 21 : Variations de l'épaisseur d'oxyde normalisé en fonction de l'ouverture du masque de nitrure (W). TYPE 1 : $X = 0.245 \mu\text{m}$, $L_{\text{mas}} = 4 \mu\text{m}$, $Y_{\text{max}} = 0.58 \mu\text{m}$ (voir figure 22).

On peut conclure que pour la structure LOCOS enterré, le phénomène d'amincissement est contrôlé par la déflexion du nitrure pour des ouvertures intermédiaires du masque. Pour les ouvertures les plus étroites, c'est la non-planarité de l'interface Si/SiO₂ qui est le facteur prédominant. Au contraire, dans le cas de structures non-enterrées [7], l'amincissement est uniquement contrôlé par la déflexion du nitrure.

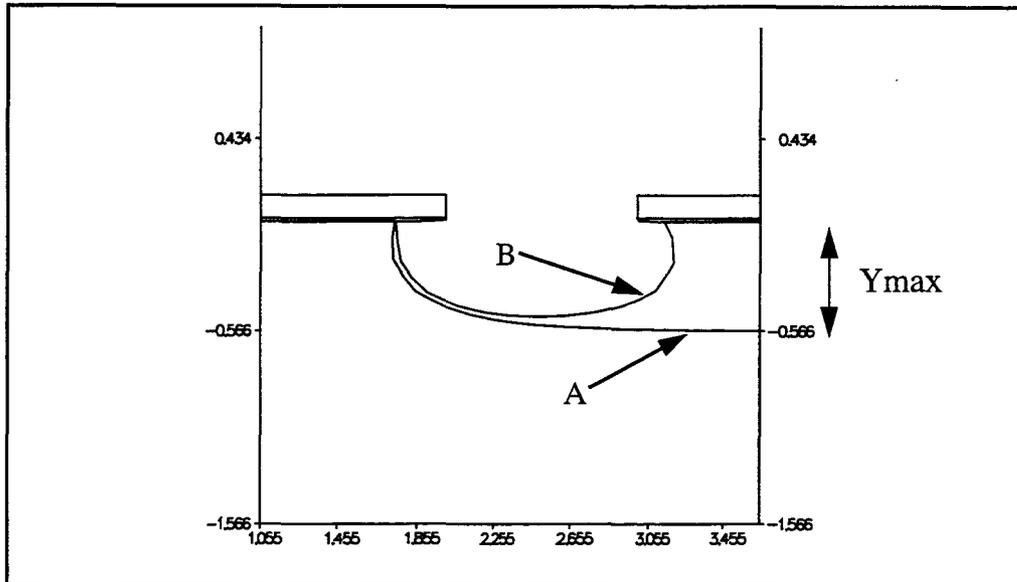


Figure 22 : Comparaison de la forme des gravures initiales (type1) pour deux ouvertures du masques de nitrure : A) $W=12\mu\text{m}$, B) $W=1\mu\text{m}$. La profondeur de gravure diminue avec des ouvertures étroites.

Il faut noter finalement que la profondeur de gravure simulée (Y) diminue lorsque l'ouverture du masque est réduite (figure 22). Ceci a été caractérisé expérimentalement [8] et il a été observé que des variations importantes apparaissent pour des ouvertures inférieures à $2\mu\text{m}$.

Par conséquent, si l'on analyse la variation de la proportion d'oxyde enterré ($R1/TOX$) en fonction de l'ouverture, on s'aperçoit qu'elle augmente jusqu'à une ouverture de $2\mu\text{m}$ (figure 23). Pour une ouverture de $12\mu\text{m}$, 88% de l'oxyde est enterré, le ratio passe à 94 % pour $2\mu\text{m}$. En dessous de $2\mu\text{m}$, la proportion diminue à nouveau (84% pour $0.5\mu\text{m}$) parce que la profondeur de gravure diminue.

En conclusion, une ouverture minimale de $0.8\mu\text{m}$ garantit la qualité de l'isolation latérale du procédé QUBIC1. Cependant, l'espacement optimum entre zones actives est atteint autour de $2\mu\text{m}$, pour lequel la proportion d'oxyde enterré est maximale.

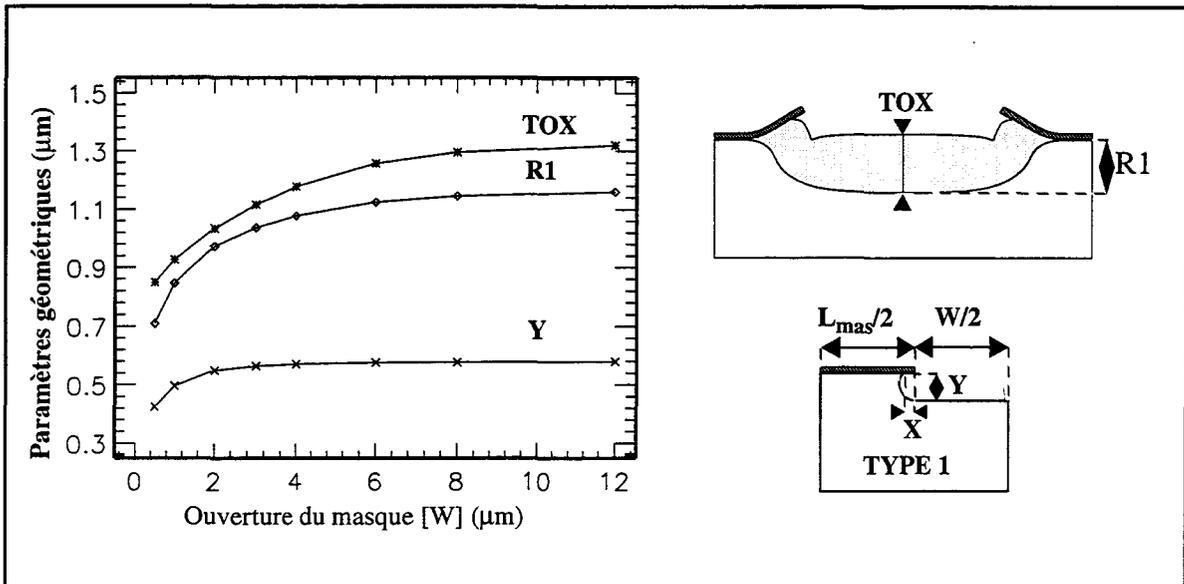


Figure 23 : Caractéristiques géométriques de l'isolation enterrée en fonction de l'ouverture du masque. $X=0.245 \mu\text{m}$, $L_{\text{mas}}=4 \mu\text{m}$ et le temps d'oxydation est égal à 405 minutes.

1.3.2 Etude de l'efficacité des masques de longueurs réduites

Dans cette analyse, on étudie la capacité du masque à éviter le perçage de l'oxyde à travers la zone active lorsque la longueur du masque est réduite. La structure simulée correspond à deux becs d'oiseau se faisant face. L'ouverture du nitrure est gardée constante, égale à $8 \mu\text{m}$. La gravure de l'oxyde est proche de la réalité (type 1). Les évolutions de l'épaisseur centrale du piédestal et de la largeur de la zone active en fonction de la longueur du masque sont rapportées à la figure 24.

Les profils d'oxyde correspondants sont comparés à la figure 25. On s'aperçoit que des masques de longueurs inférieures à $2.5 \mu\text{m}$ sont mécaniquement trop faibles pour empêcher le perçage de l'oxyde. Par conséquent, en dessous de $2.5 \mu\text{m}$, la zone active disparaît et l'épaisseur du piédestal augmente dramatiquement. L'accord avec l'expérience est très correct.

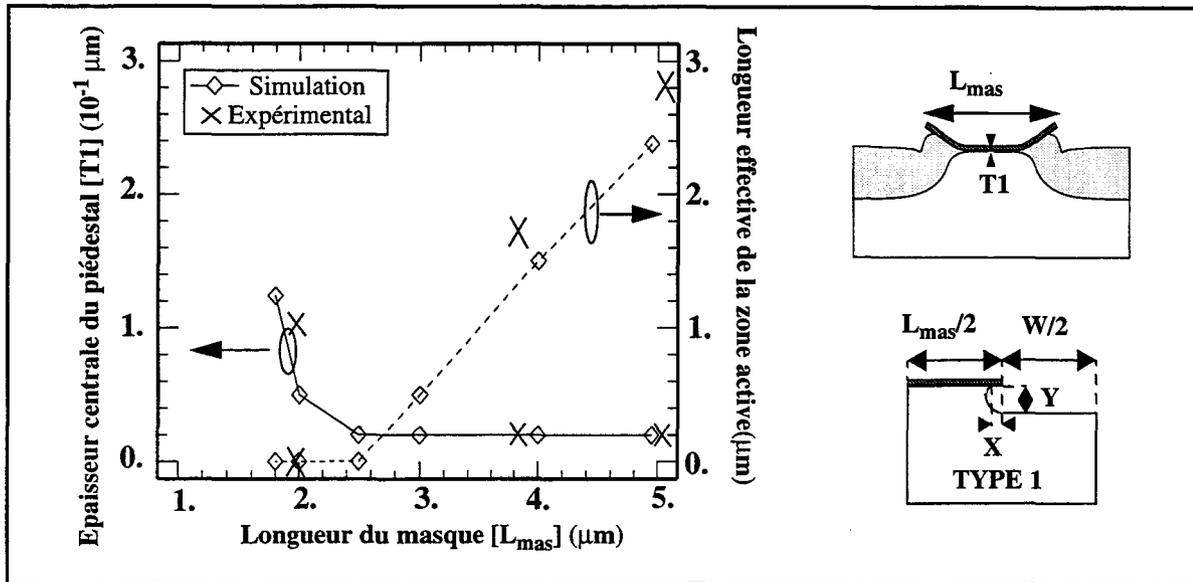


Figure 24 : Variations de l'épaisseur centrale du piédestal [T1] et de la longueur effective de la zone active en fonction de la longueur du masque [L_{mas}]. Temps d'oxydation : 405 minutes, $X=0.245 \mu\text{m}$, $Y=0.58 \mu\text{m}$, $W=8. \mu\text{m}$.

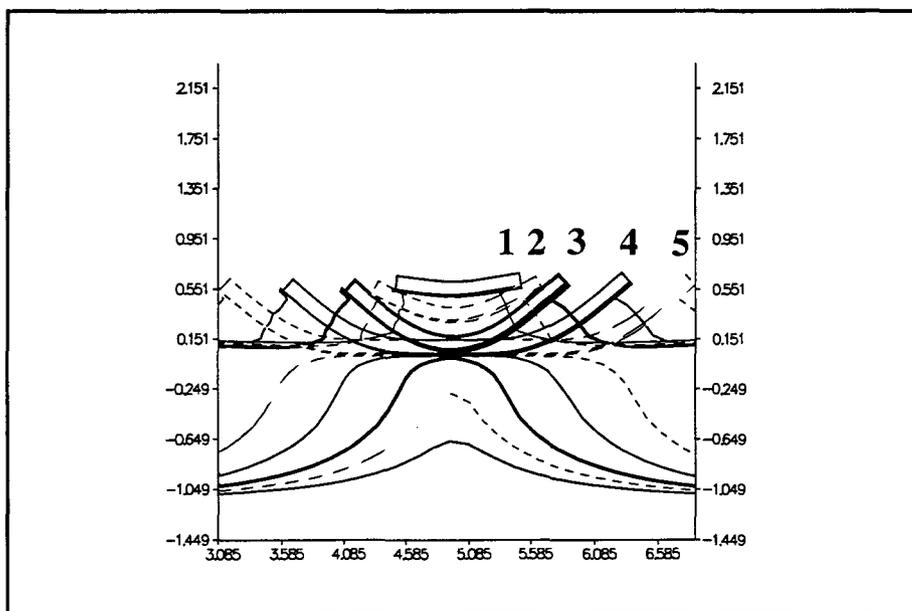


Figure 25 : Formes du bec d'oiseau pour différentes longueurs du masque : 1) $L_{\text{mas}}=1 \mu\text{m}$, 2) $L_{\text{mas}}= 1.8 \mu\text{m}$, 3) $L_{\text{mas}}= 2 \mu\text{m}$, 4) $L_{\text{mas}}= 3 \mu\text{m}$, 5) $L_{\text{mas}}= 4 \mu\text{m}$. Temps d'oxydation : 405 minutes, $X=0.245 \mu\text{m}$, $Y=0.58 \mu\text{m}$, $W=4. \mu\text{m}$.

1.4 Comparaison avec la structure LOCOS équivalente

Dans le but d'évaluer les avantages et inconvénients de la structure enterrée, la structure LOCOS correspondante a été simulée dans les mêmes conditions d'oxydation. La figure 26 présente l'évolution temporelle de la géométrie de chaque dispositif. Les profils finaux sont comparés à la figure 27. Si le LOCOS enterré possède l'avantage d'avoir une proportion d'oxyde enterré plus grande, il a néanmoins l'inconvénient d'empiéter beaucoup plus sur la zone active. Le calcul des contraintes de cisaillement de la silice dans le plan (111) du silicium permet de définir les sensibilités d'un dispositif face au problème de l'apparition de dislocations dans le substrat. La distribution bidimensionnelle de ces contraintes pour ces deux structures (figures 28 et 29) montre clairement que le LOCOS enterré est le plus susceptible de créer ces défauts cristallins (figure 28).

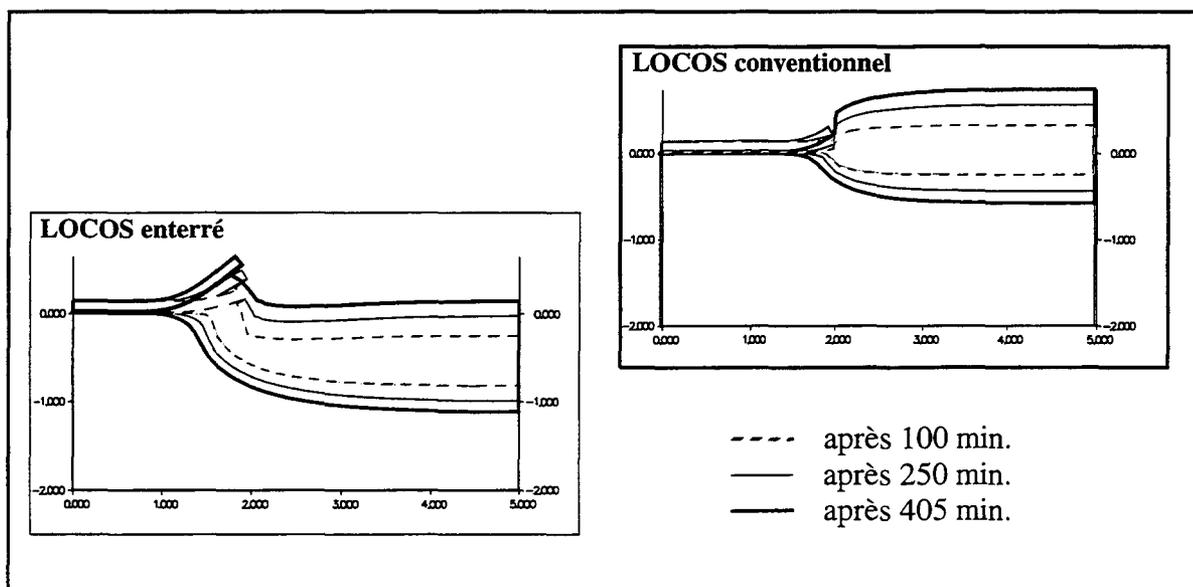


Figure 26 : Evolution temporelle des isolations de types LOCOS et LOCOS enterré. Les conditions d'oxydation sont celles du procédé QUBIC1.

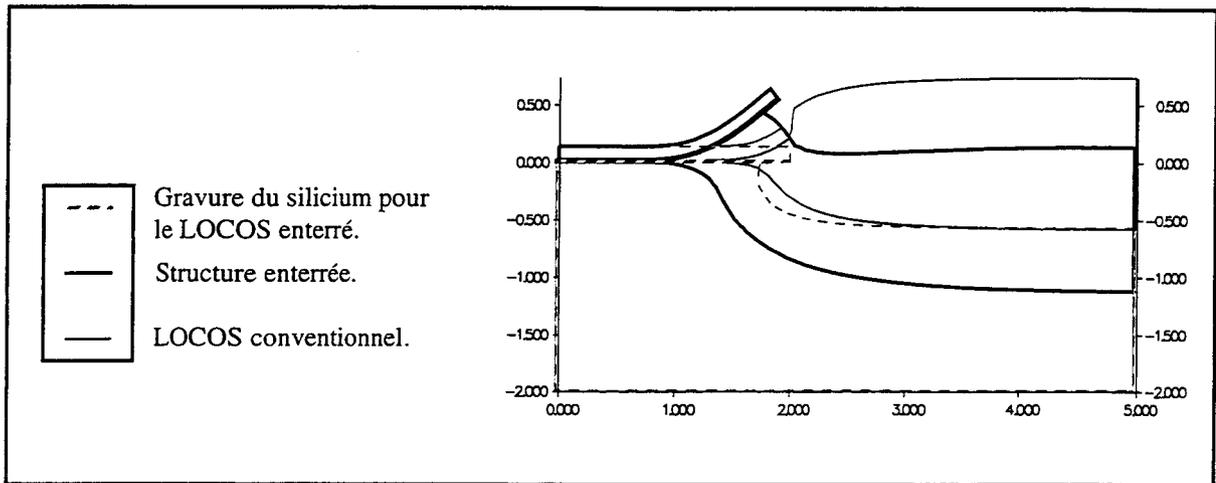


Figure 27 : Comparaison des structures enterrée et non-enterrée après 405 minutes d'oxydation en ambiance humide à 1000°C.

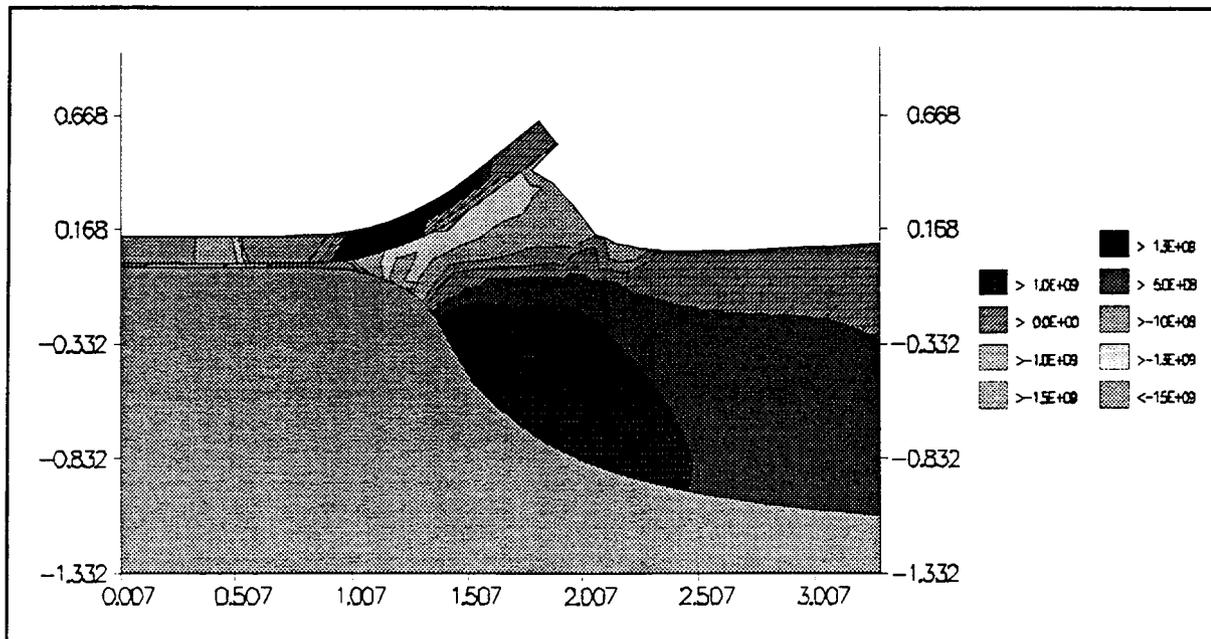


Figure 28 : Distribution 2D des contraintes de cisailment calculées dans le plan (111) du silicium pour le LOCOS enterré. Temps d'oxydation : 405 minutes, $X=0.245 \mu\text{m}$, $Y=0.58 \mu\text{m}$, $W=6. \mu\text{m}$, $L_{\text{mas}}=4 \mu\text{m}$.

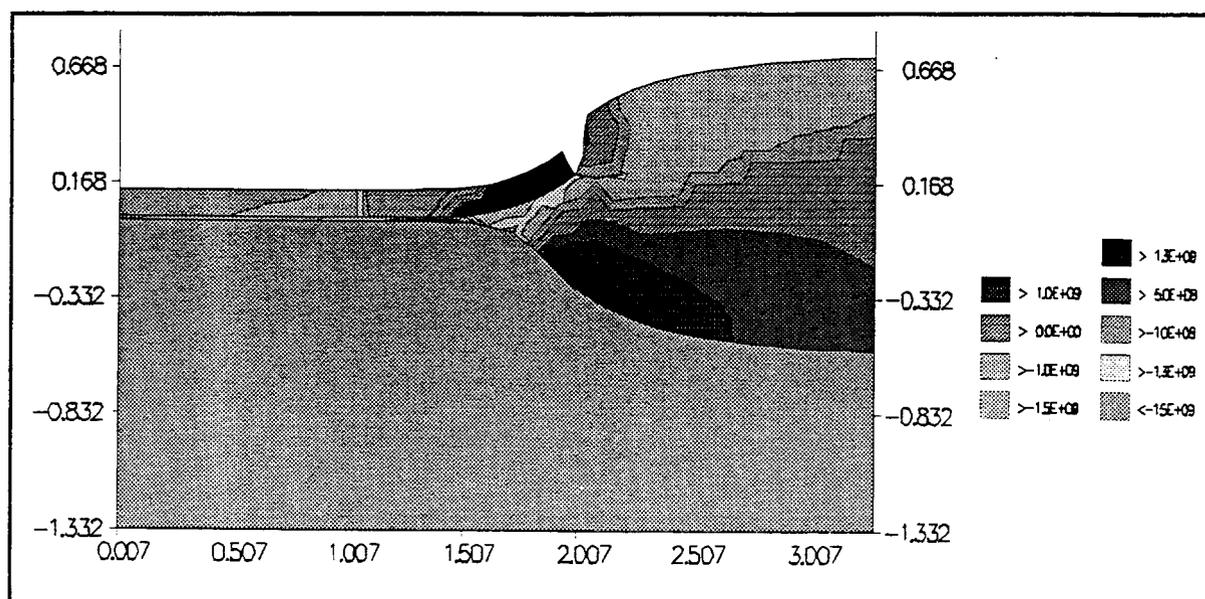


Figure 29 : Distribution 2D des contraintes de cisaillement calculées dans le plan (111) du silicium pour le LOCOS. Temps d'oxydation : 405 minutes, $W=6 \mu\text{m}$, $L_{\text{mas}}=4 \mu\text{m}$.

En conclusion, le LOCOS enterré génère un bec d'oiseau et un niveau de contraintes plus importants que le LOCOS conventionnel, mais tel est le prix à payer pour obtenir une meilleure planarité.

2. ANALYSE DE STRUCTURES AVANCEES [9]

2.1 Optimisation d'une structure SILO

Le procédé SILO est une des améliorations de la technique conventionnelle du LOCOS. Son principe consiste à réduire la diffusion des agents oxydants sous le masque par le scellement d'une fine couche de nitrure (nitrure I) directement sur le substrat. Ce scellement est réalisé par dépôt ou nitruration et la qualité de l'adhésion dépend de la stoechiométrie de la couche d'oxynitrure présente à l'interface. Cette couche résulte de la difficulté d'obtenir des interfaces parfaitement pures. Etant donné

l'impossibilité d'annihiler complètement la diffusion des oxydants sous le masque, ce dernier est complété par un bicouche épais (oxyde/nitride II) dont le rôle est de s'opposer mécaniquement à la réaction d'oxydation sous le masque. L'épaisseur de l'oxyde intermédiaire est dimensionnée de manière à absorber les contraintes mécaniques induites par le nitride II et de prévenir ainsi les dislocations dans le silicium. La figure 30 illustre ce procédé, décrivant la structure initiale et la forme d'oxyde après oxydation. Avec un procédé optimisé, des longueurs de becs d'oiseau inférieures à 100 nm peuvent être obtenues, tout en minimisant les contraintes.

Ce paragraphe s'attache à présenter une modélisation originale du scellement Silicium/Nitride, qui est ensuite utilisée pour simuler un procédé de type SILO-RTN.

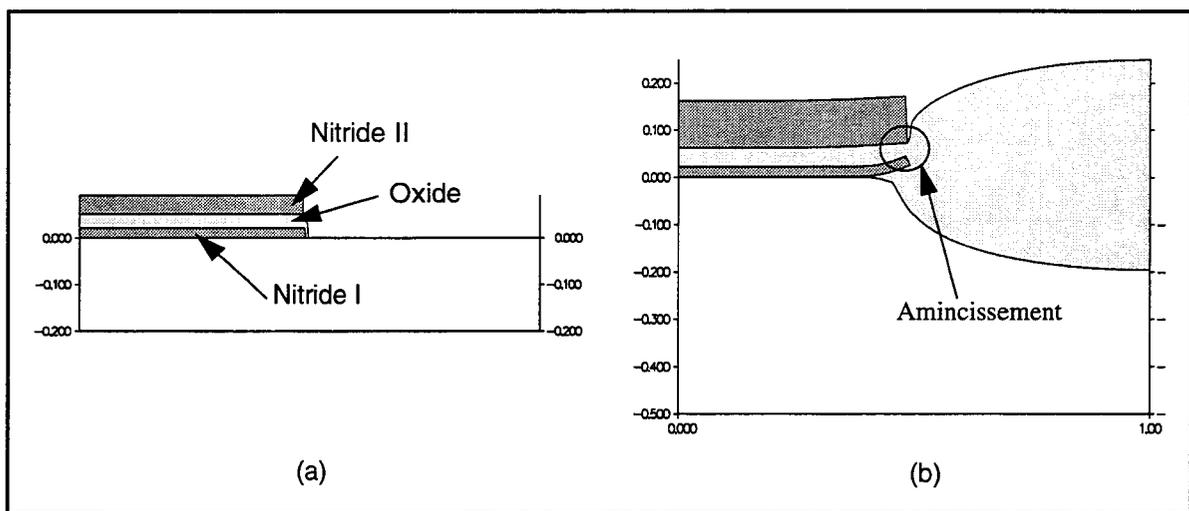


Figure 30 : a) Structure initiale du dispositif SILO, b) forme d'oxyde finale. L'amincissement de la couche d'oxyde à l'extrémité du masque met en évidence son rôle d'amortisseur des contraintes.

2.1.1 Modélisation du scellement [10]

La difficulté supplémentaire de la simulation de la structure SILO, par rapport au LOCOS conventionnel, est la nécessité de rendre compte de la qualité de l'adhésion du nitride sur le substrat, qui conditionne l'exactitude de la forme du bec d'oiseau. Une approche antérieure [11] suppose un scellement parfait des deux couches. Ceci se traduit, au point de contact entre l'oxyde, le silicium et le nitride I, par une vitesse d'oxydation parallèle à l'interface (figure 31a). Afin de tenir compte de condi-

tions technologiques imparfaites, la modélisation qui est ici proposée considère l'existence d'une couche supplémentaire d'oxynitride entre le nitrure I et le substrat, dont l'épaisseur est d'environ 15 Å (figure 31b). La particularité de cette couche par rapport à l'oxyde est que la diffusivité des agents oxydants y est réduite :

$$D_{oxnit} = \alpha_{nit} D_{ox} \exp\left(-\frac{PV_D}{kT}\right) \quad (1)$$

où D_{ox} est la diffusivité intrinsèque, P est la pression hydrostatique dans l'oxynitride, V_D est le volume d'activation de l'effet de la pression sur la diffusivité, k et T sont respectivement la constante de Boltzmann et la température. α_{nit} est un paramètre d'ajustement qui rend compte macroscopiquement de la qualité de l'adhésion qui dépend de la stoechiométrie de la couche, du type de dépôt ou de nitruration et de l'épaisseur du nitrure I.

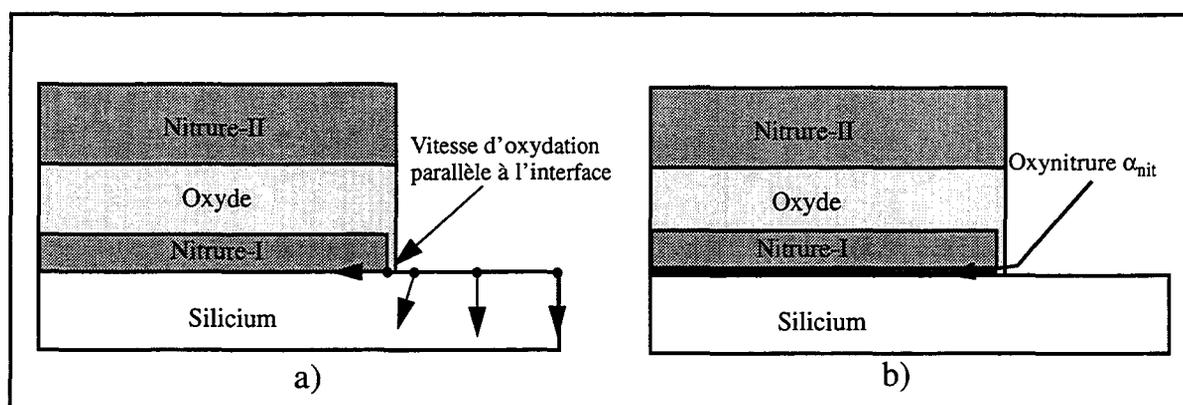


Figure 31 : Modélisation du scellement du nitrure I avec le substrat : a) adhésion parfaite, la vitesse d'oxydation est parallèle à l'interface, b) l'imperfection du scellement est modélisée par l'introduction d'une fine couche d'oxynitruure.

La figure 32 présente des résultats de simulation obtenus avec cette modélisation. Un scellement parfait du nitrure-I sur le substrat est modélisé avec une très faible valeur de α_{nit} (figure 32a). La diffusion latérale des oxydants est totalement inhibée et conduit à un bec d'oiseau de taille réduite. Pour $\alpha_{nit}=1$, ce qui correspond à un contact totalement imparfait, on obtient des longueurs de bec d'oiseau comparables à celles des LOCOS classiques (figure 32b). Les profils 2D de la pression hydrostatique indiquent que plus la qualité du contact est élevée, plus l'extension des contraintes élevées est grande et risque de créer des dislocations dans le substrat.

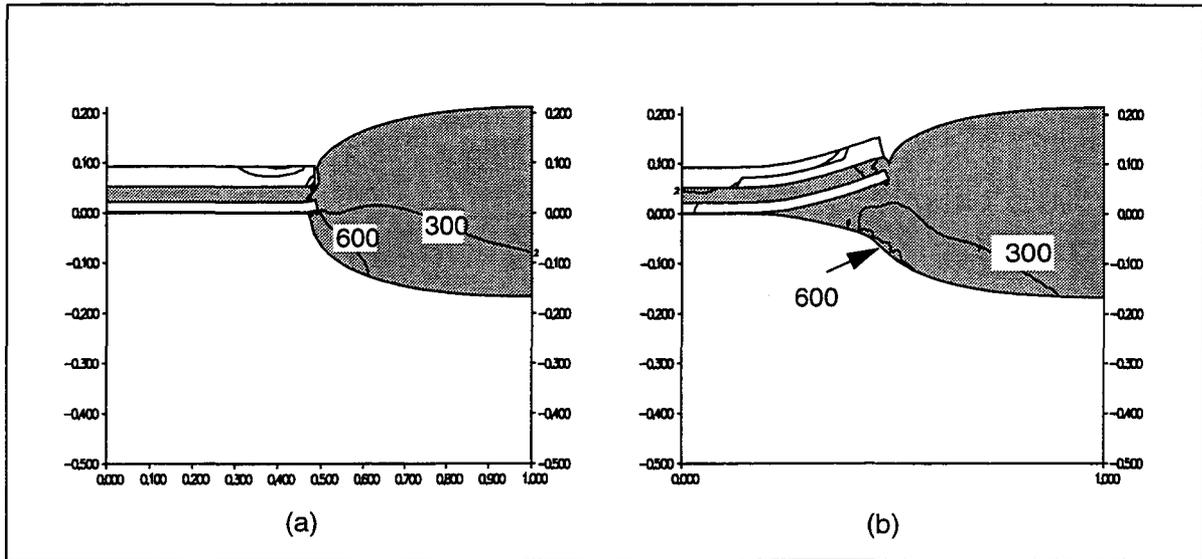


Figure 32 : Simulations de structures SILO pour deux cas extrêmes de la qualité du scellement : a) $\alpha_{\text{nit}} = 0$, b) $\alpha_{\text{nit}} = 1$. La distribution de la pression est donnée en MPa.

2.1.2 Simulation d'une technologie SILO-RTN

L'étude quantitative d'une structure SILO-RTN est réalisée à partir de cette modélisation. La couche de nitrure I est scellée grâce à une nitruration thermique rapide du silicium à 1000°C [12]. Les meilleurs accords simulation/expérience, en termes de forme d'oxyde sont obtenus pour une valeur intermédiaire du coefficient α_{nit} ($\alpha_{\text{nit}}=0.25$). Le résultat de la simulation est montré en figure 33 avec la distribution de la pression hydrostatique interne. Elle aboutit à un bon accord avec la photographie SEM du résultat expérimental fournie par Déléonibus [12].

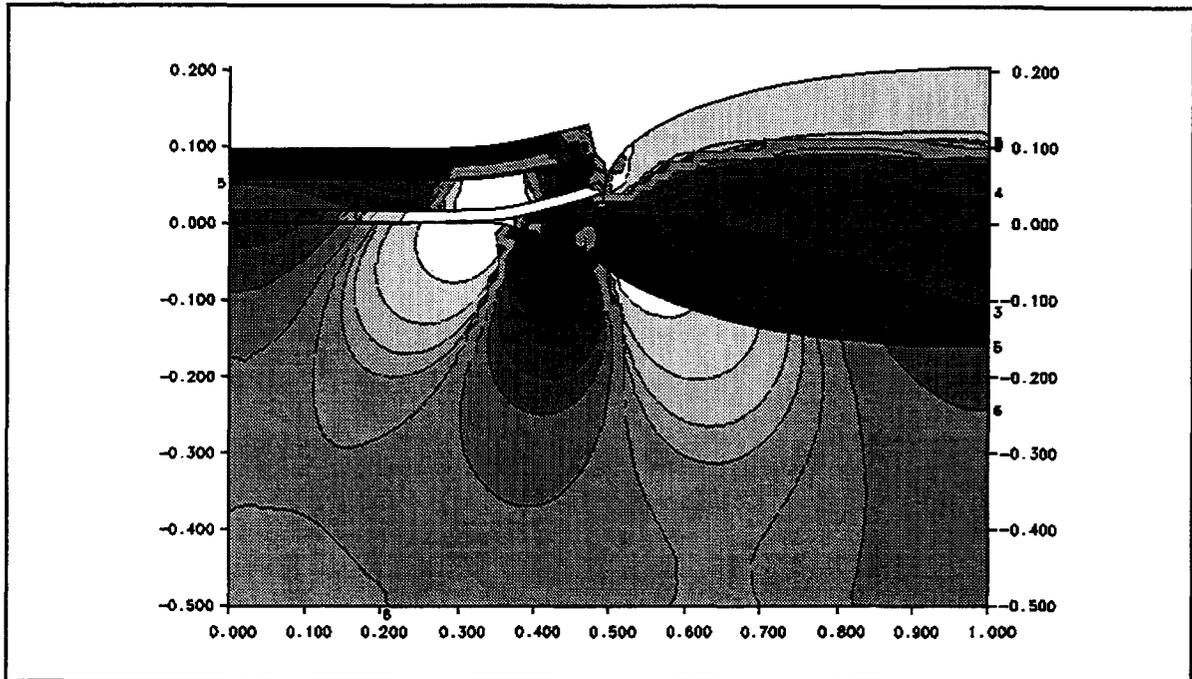


Figure 33 : Simulation d'une structure SILO : résultat de la simulation, présenté avec le profil de pression. Les zones foncées correspondent au maximum de pression ($\approx +500$ MPa) et les zones claires au maximum de tension (≈ -500 MPa).

Sans autre ajustement de paramètres et en utilisant les valeurs de la calibration exposée au chapitre précédent, la simulation de la variation des longueurs de becs d'oiseau (paramètre B_2 de la figure 15 du chapitre IV) avec les épaisseurs de la couche de nitrure II et de l'oxyde de champ a été réalisée et présente un excellent accord avec les résultats expérimentaux (figure 34).

Enfin, le comportement du procédé SILO face au problème de l'amincissement de l'oxyde pour des petites ouvertures du masque est investigué (figure 35). La confrontation des résultats de simulation avec l'expérience démontre la bonne capacité de prédiction du modèle pour ce type d'analyse.

L'utilisation de cette modélisation dans le but d'optimiser le masque de nitrure est ainsi validée.

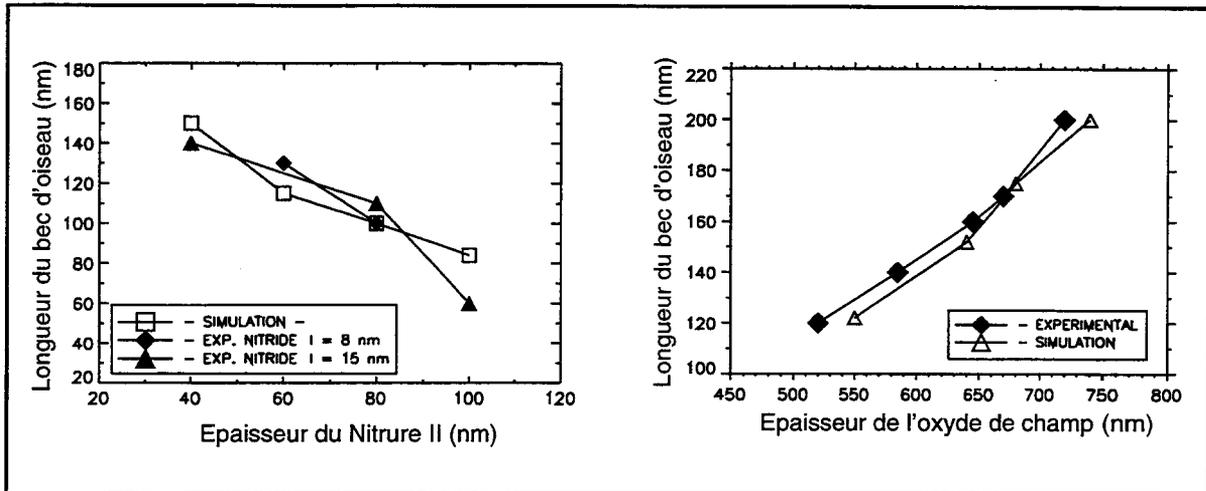


Figure 34 : Variation de la longueur de bec d'oiseau avec a) l'épaisseur de la couche de nitrure II, b) l'épaisseur de l'oxyde de champ. L'épaisseur de la couche d'oxyde du masque est de 40 nm. Les résultats expérimentaux correspondent à deux épaisseurs du nitrure I: 8 et 15 nm [12].

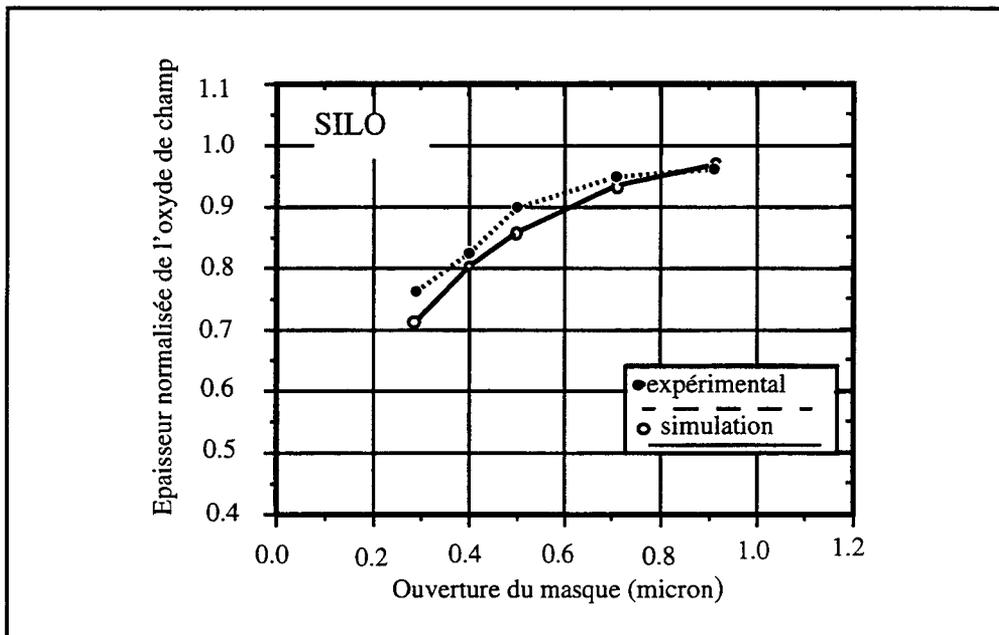


Figure 35 : Variation de l'épaisseur normalisée de l'oxyde de champ d'une structure SILO, fabriquée à 950°C (120.5 minutes) en fonction de l'ouverture du masque. Les caractéristiques du masque sont 10 nm de nitrure I/ 40 nm d'oxyde/ 50 nm de nitrure II. Le résultat expérimental de Déléonibus [15] est également rapporté.

L'optimisation du masque de nitrure qui est ici relatée vise à déterminer les influences respectives des trois couches, nitrure I, oxyde et nitrure II, sur le niveau de contraintes dans le substrat et, corrélativement, sur sa qualité cristalline. La composante normale suivant la direction Y du tenseur des contraintes est ici choisie comme indicateur du niveau de contraintes dans le silicium.

De plus, dans cet exemple, l'extension spatiale de l'isovaleur à +50 MPa est définie comme révélateur de la présence ou non de dislocations. Cette valeur est choisie arbitrairement puisque la corrélation entre l'existence de contraintes tensiles importantes dans le substrat et l'apparition de défauts cristallins est encore inconnue.

Deux épaisseurs extrêmes du nitrure II ont été investiguées, qui correspondent respectivement aux cas "nitrure II fin" ($T_{\text{nitII}}=50\text{nm}$) et "nitrure II épais" ($T_{\text{nitII}}=125\text{nm}$) dans le tableau de la figure 36.

Pour le cas le plus épais, on s'aperçoit qu'il y a systématiquement création d'une large zone tensile dans le substrat. Ni une couche d'oxyde épaisse (50nm), ni un scellement imparfait ($\alpha_{\text{nit}}=1$) du nitrure I ne permettent de diminuer l'extension de cette région fortement contrainte. Ceci est en accord avec les observations expérimentales qui indiquent la présence de dislocations pour chacune de ces quatre configurations.

Par contre, la génération de contraintes tensiles dans le silicium par le plus fin des nitrures II est fortement dépendante de la configuration du bicouche nitrure I/oxyde. Avec une couche d'oxyde peu épaisse (8nm) ou un très bon contact ($\alpha_{\text{nit}}=0.15$) du nitrure I, la structure présente [12] à nouveau des défauts cristallins auxquels correspond une large extension de la zone de fortes contraintes.

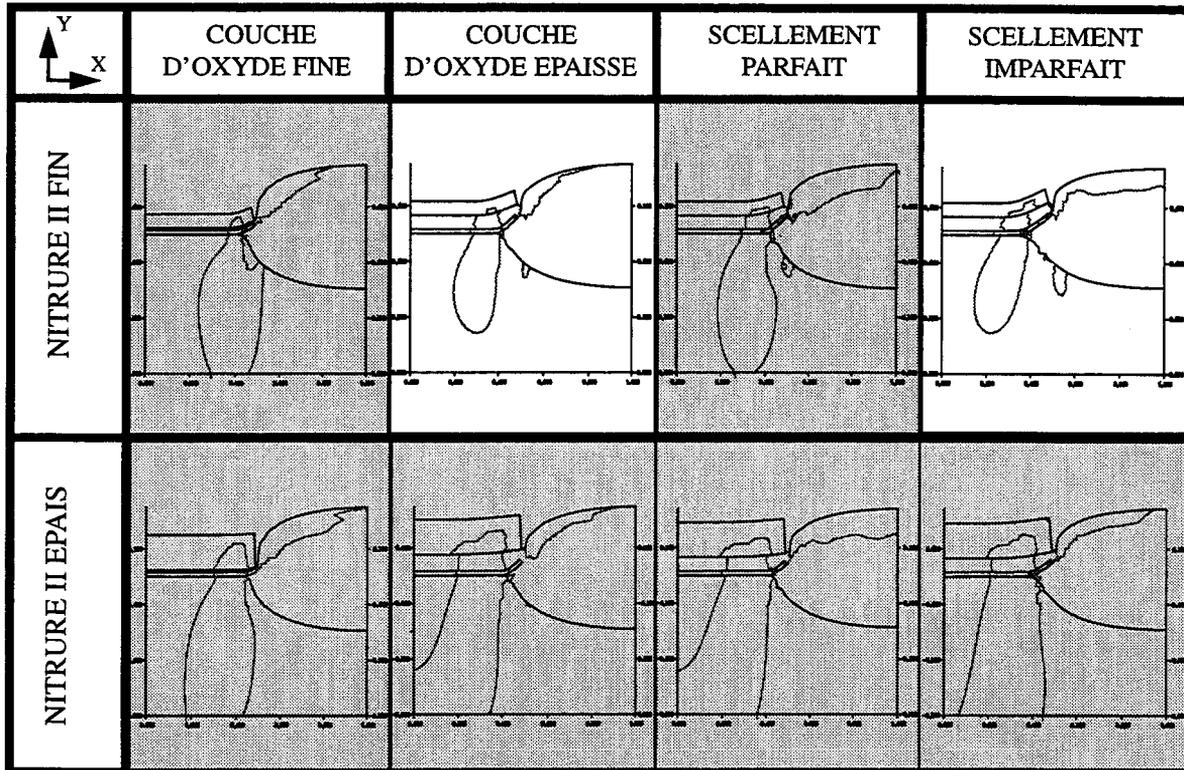


Figure 36 : Sensibilité du procédé SILO à la génération de dislocations dans le substrat en fonction de la configuration du masque d'oxydation. Les figures grisées correspondent à des dispositifs présentant des dislocations d'après les résultats expérimentaux de Déléonibus [12]. L'isovaleur égale à 50 MPa définie la zone tensile de la composante normale suivant Y du tenseur des contraintes. Elle permet d'évaluer si des dislocations sont générées ou non.

2.2 Etude d'une structure PBL

Le procédé PBL améliore les performances du LOCOS classique grâce à l'introduction d'une couche de polysilicium entre le piédestal d'oxyde et le nitrure qui augmente l'absorption des contraintes mécaniques et permet donc d'épaissir la couche de nitrure sans craindre de générer des dislocations dans le silicium. L'étude d'une structure PBL rapportée dans ce paragraphe permet d'évaluer l'influence de l'épaisseur du piédestal sur les caractéristiques géométriques du bec d'oiseau et sur le niveau de contraintes dans le substrat. Le comportement du dispositif face au problème d'amin-

cissement de l'oxyde est également investigué. Enfin, le phénomène de perçage de l'oxyde permet de comparer l'efficacité du masque du PBL avec celle de structures possédant des espaceurs de nitrure ou une encapsulation du masque.

2.2.1 Influences de l'épaisseur du piédestal d'oxyde

La structure PBL est fabriquée à 1000°C et possède une épaisseur finale de l'oxyde de champ égale à 0.6 μm . Le masque d'oxydation nominal comprend un piédestal de 10 nm, une couche de polysilicium égale à 50 nm et un nitrure de 200 nm. La structure simulée possède une couche d'oxyde supplémentaire entre le polysilicium et le nitrure, nécessaire aux procédures de mise à jour de la topologie. D'une épaisseur de 3 nm, ses caractéristiques sont identiques à la couche d'oxynitrure décrite pour la structure SILO, c'est à dire que la diffusivité des oxydants y est modulable. Dans le cadre des simulations rapportées ici, cette diffusivité est complètement annihilée, ne permettant aucun oxydation entre le nitrure et le polysilicium.

Le procédé est simulé pour quatre épaisseurs différentes du piédestal : 10, 20, 30 et 40 nm. Les formes d'oxyde résultantes sont données aux figures 37 et 38. La longueur du bec d'oiseau (B_1) et la déflexion du nitrure (H_3) ont été sélectionnées pour rendre compte des variations de la forme du bec d'oiseau (insertion de la figure 37). Les résultats indiquent que jusqu'à une épaisseur de 30 nm, la longueur du bec d'oiseau reste inférieure aux 200 nm typiques des structures PBL (figure 39). Au delà, la consommation importante du silicium et du polysilicium, autorisée par un flux considérable d'agents oxydants sous le masque, détériore complètement l'efficacité du masque.

L'étude des résultats en termes de pression hydrostatique ne permet pas de faire apparaître l'influence du piédestal sur la génération de dislocations dans le substrat. Cependant, pour un procédé équivalent, Ghezzi [13] a observé expérimentalement des défauts cristallins dans le silicium pour des épaisseurs du piédestal inférieures à 30 nm. Cette constatation semble indiquer que la modélisation rhéologique purement élastique adoptée pour le polysilicium en couche mince n'est pas adéquate. En effet, le mécanisme de relaxation des contraintes par le polysilicium a récemment été étudié [14] et indique que la relaxation s'effectue par la diffusion, assistée par les contraintes, d'atomes de silicium qui crée des micro-cavités dans le polysilicium. Une macro-modélisation de ce phénomène semble nécessaire si l'on souhaite rendre compte de l'influence de la topologie du masque du PBL sur le niveau de contraintes dans le silicium.

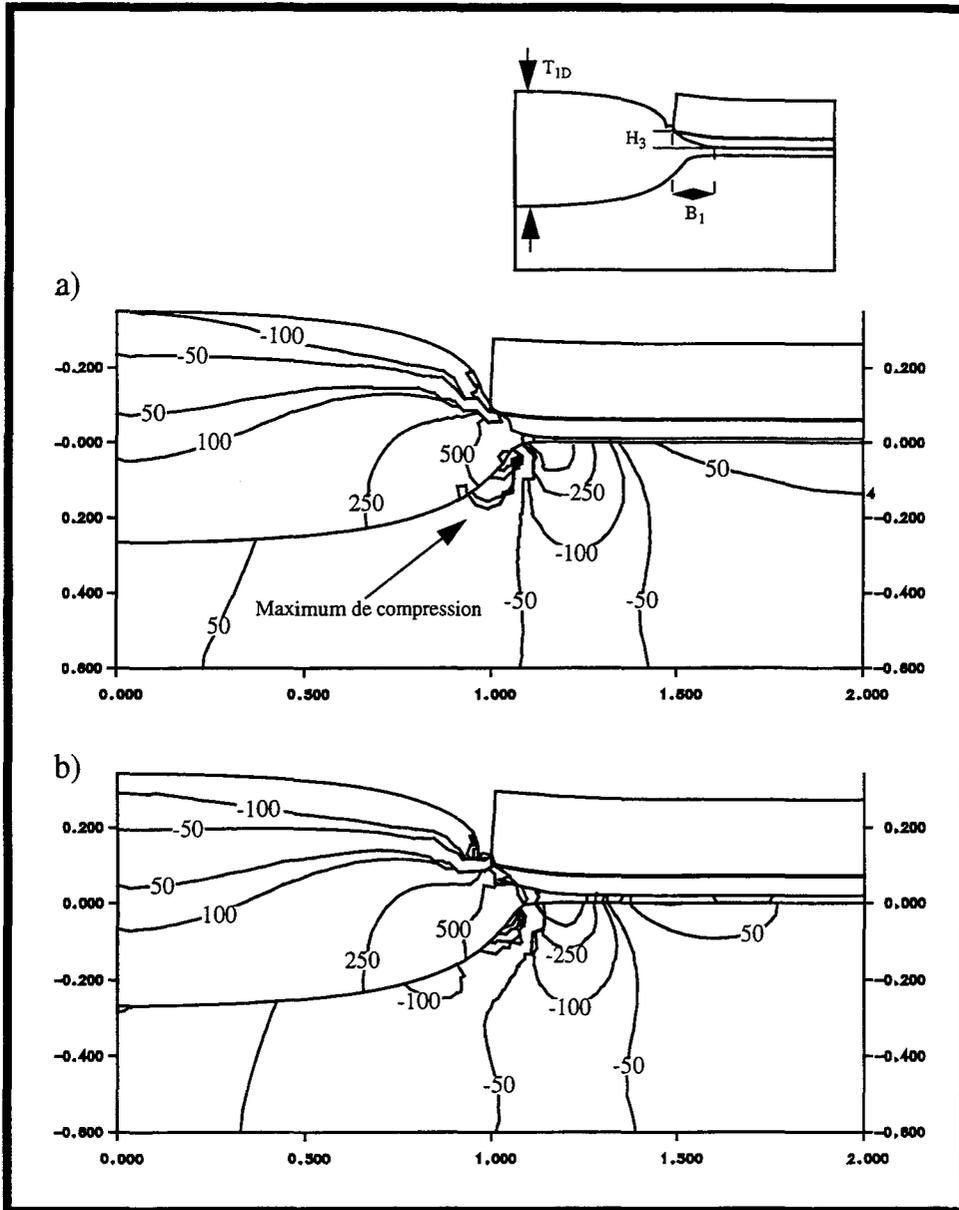


Figure 37 : Structures PBL fabriquées à 1000°C , possédant une épaisseur d'oxyde de champ égale à $0.6 \mu\text{m}$. Le masque est constitué de 200nm de Si_3N_4 , 50 nm de polysilicium et a) 10 nm, b) 20 nm d'oxyde. La pression hydrostatique est donnée en MPa.

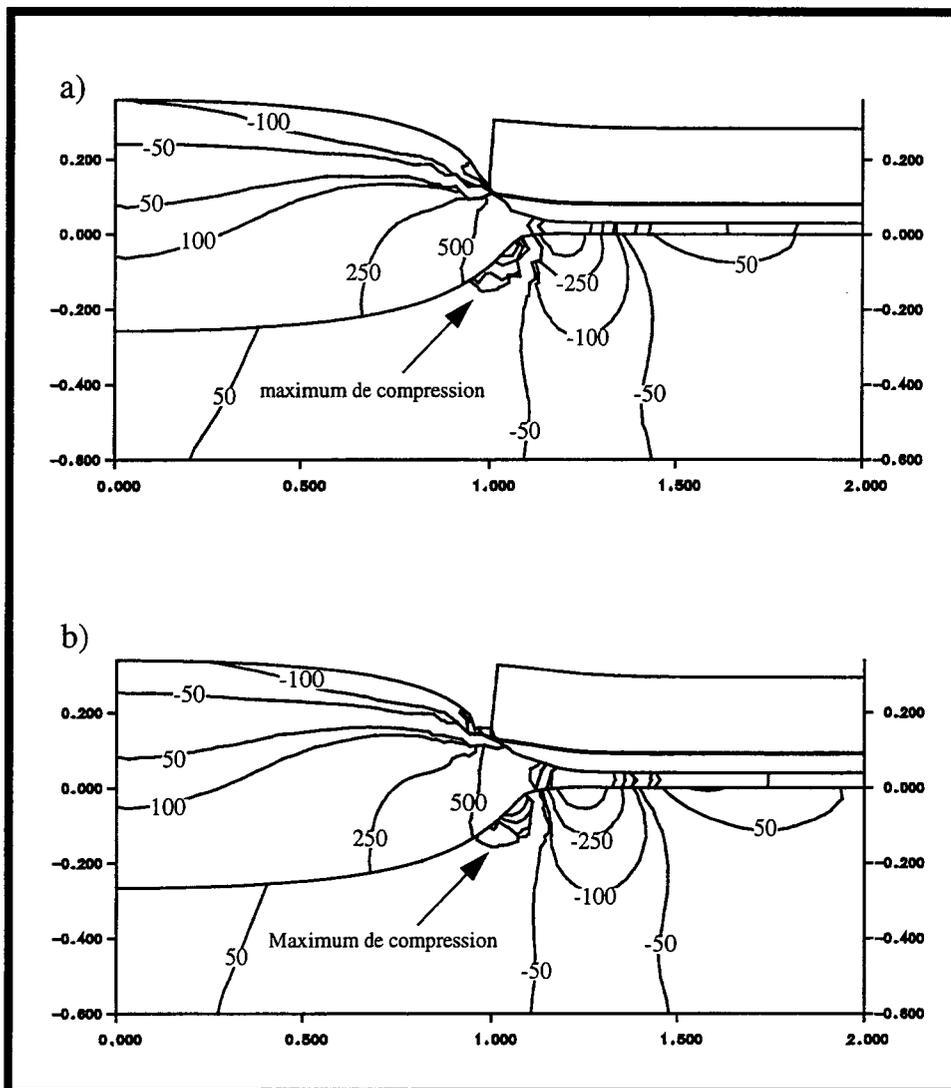


Figure 38 : Structures PBL fabriquées à 1000°C, possédant une épaisseur d'oxyde de champ égale à 0.6 μm . Le masque est constitué de 200nm de Si_3N_4 , 50 nm de polysilicium et a) 30 nm, b) 40 nm d'oxyde. La pression hydrostatique est donnée en MPa.

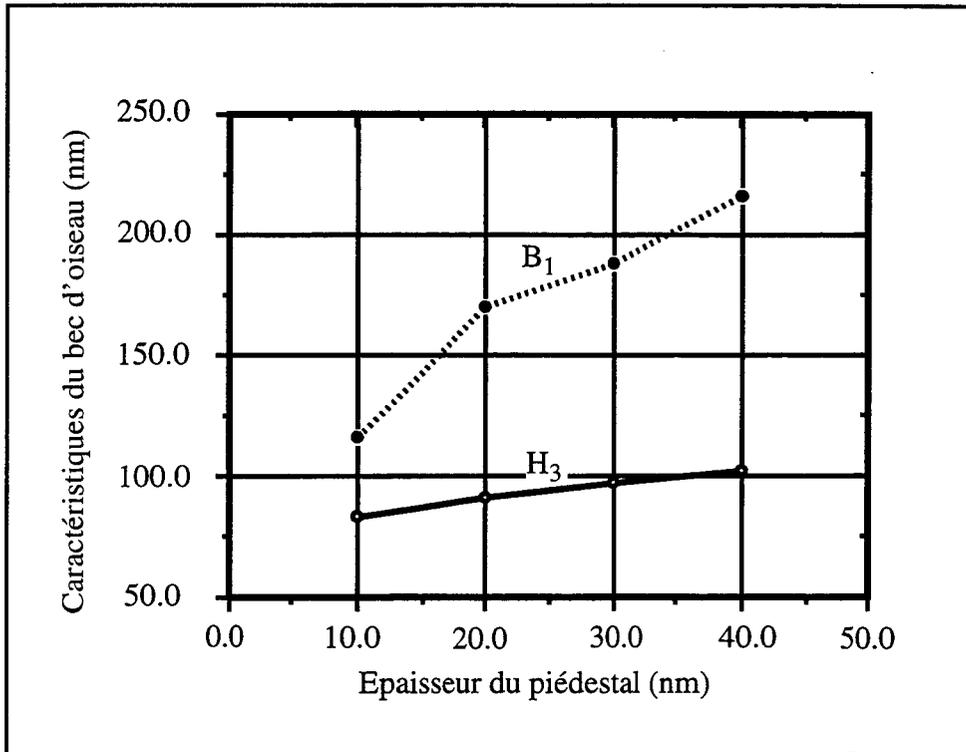


Figure 39 : Variation des paramètres géométriques sélectionnés du bec d'oiseau en fonction de l'épaisseur du piédestal.

2.2.2 Amincissement de l'oxyde

Le dispositif a été simulé pour six ouvertures différentes du masque : 0.5, 0.6, 0.8, 1.0, 1.5 et 2.0 μm . La figure 40 donne les variations de l'épaisseur normalisée de l'oxyde de champ en fonction de cette ouverture. La forme d'oxyde et la distribution de la pression hydrostatique pour une ouverture de 0.5 μm sont présentées à la figure 41 qui permet de visualiser l'importance des contraintes pour cette configuration. D'après le critère de Hui [4], on s'aperçoit que cette technologie permet d'assurer un bon isolement électrique jusqu'à des ouvertures du masque égales à 0.6 μm .

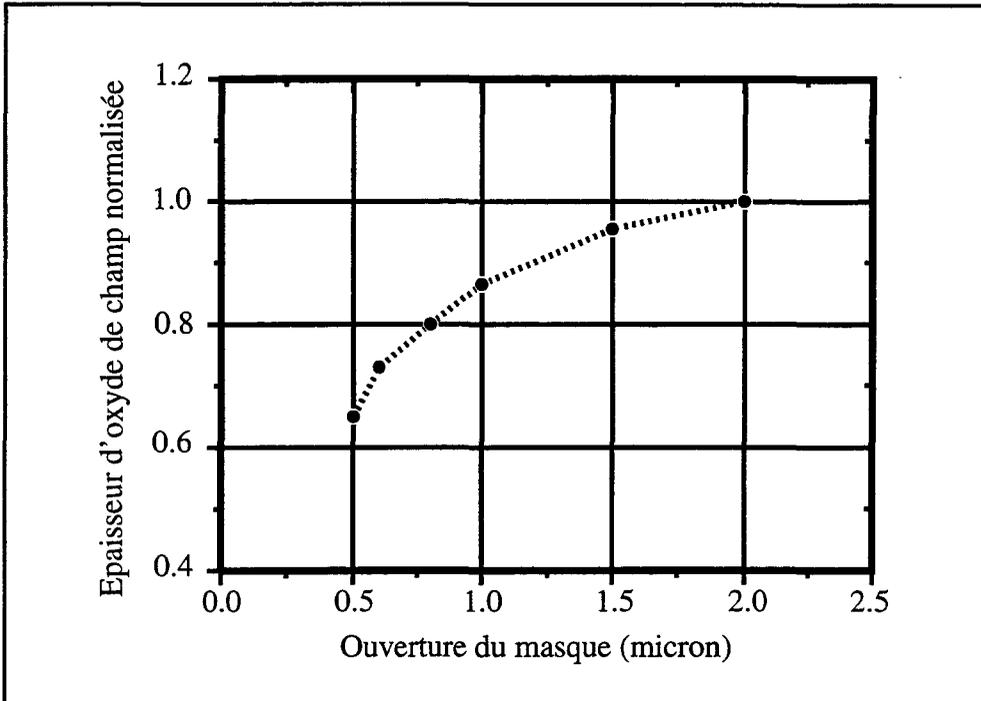


Figure 40 : Variation de l'épaisseur normalisée de l'oxyde de champ en fonction de l'ouverture du masque.

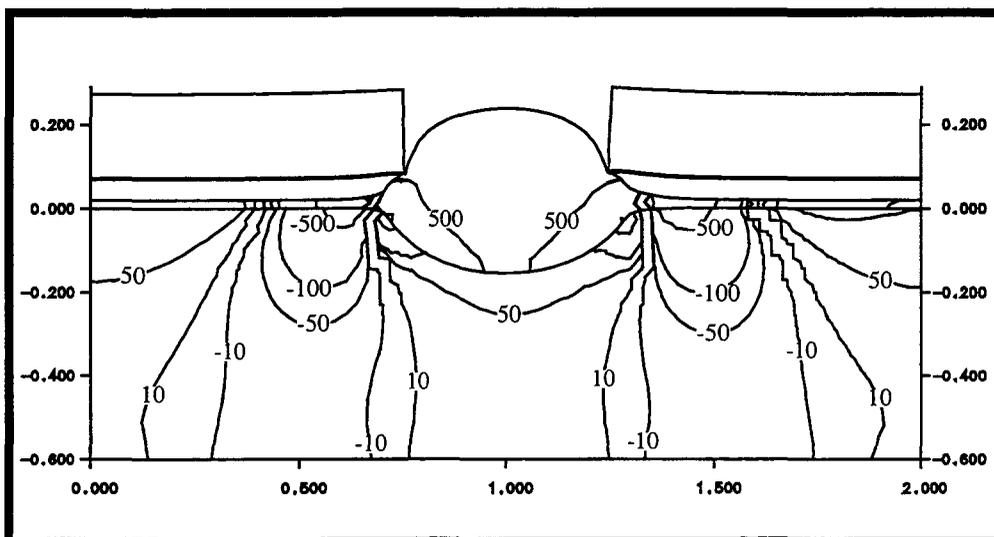


Figure 41 : Structures PBL fabriquées à 1000°C, possédant une épaisseur d'oxyde de champ égale à 0.392 μm . Le masque est constitué de 200nm de Si_3N_4 , 50 nm de polysilicium et 10 nm d'oxyde. L'ouverture du masque est de 0.5 μm . La pression hydrostatique est donnée en MPa.

2.2.3 Comparaison avec d'autres types de masques

La structure PBL classique a subi de nombreuses modifications dictées par des exigences qui réclament la formation d'un bec d'oiseau peu étendu, sans création de défauts cristallins dans le substrat, avec une bonne insensibilité au phénomène d'amincissement. Une évolution similaire est observée pour le procédé LOCOS classique qui retrouve sa place dans les dispositifs submicroniques étant donné la réduction des épaisseurs d'oxyde nécessaires à une bonne isolation électrique. Ces modifications sont ici rapportées et simulées avec le modèle complet.

A partir des procédés standards LOCOS et PBL (figure 42), une première modification consiste en l'ajout d'espaces de nitrure qui permettent de décaler la diffusion des oxydants sous le masque (figure 43). Ce type de structure souffre de l'inconvénient d'une ouverture réduite du masque de nitrure, causée par l'empiètement des espaces, qui le rend plus sensible au phénomène d'amincissement [16].

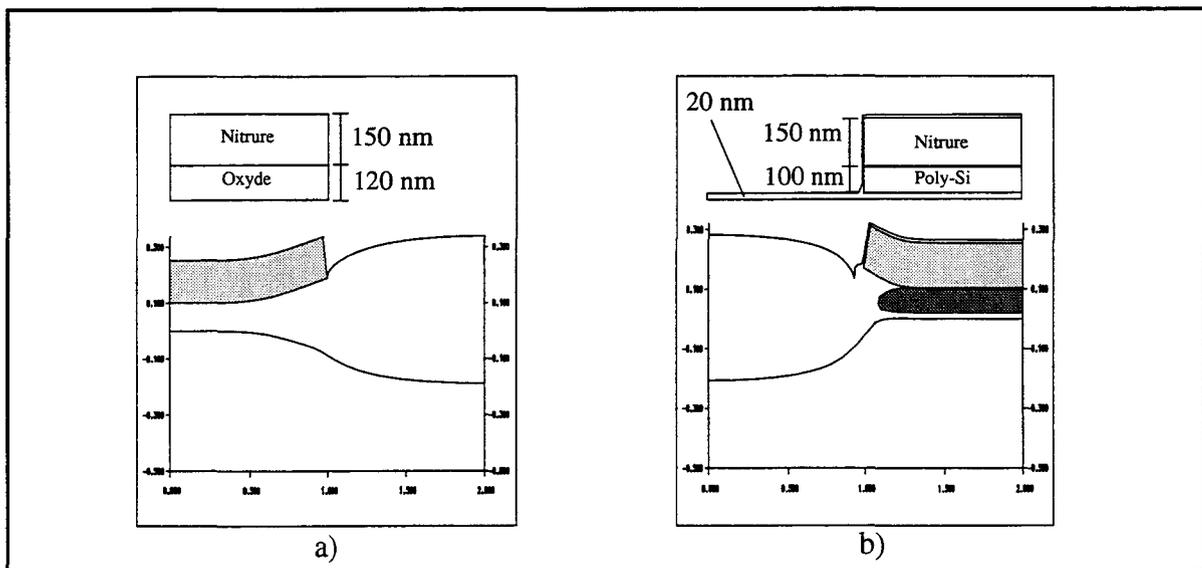


Figure 42 : Configuration initiale du masque d'oxydation et forme d'oxyde simulée pour : a) un LOCOS , b) un PBL, fabriqués en ambiance humide à 1000°C, pendant 85 minutes. La modélisation suppose, pour le PBL, l'existence d'une couche d'oxyde entre le nitrure et le polysilicium d'une épaisseur de 4nm.

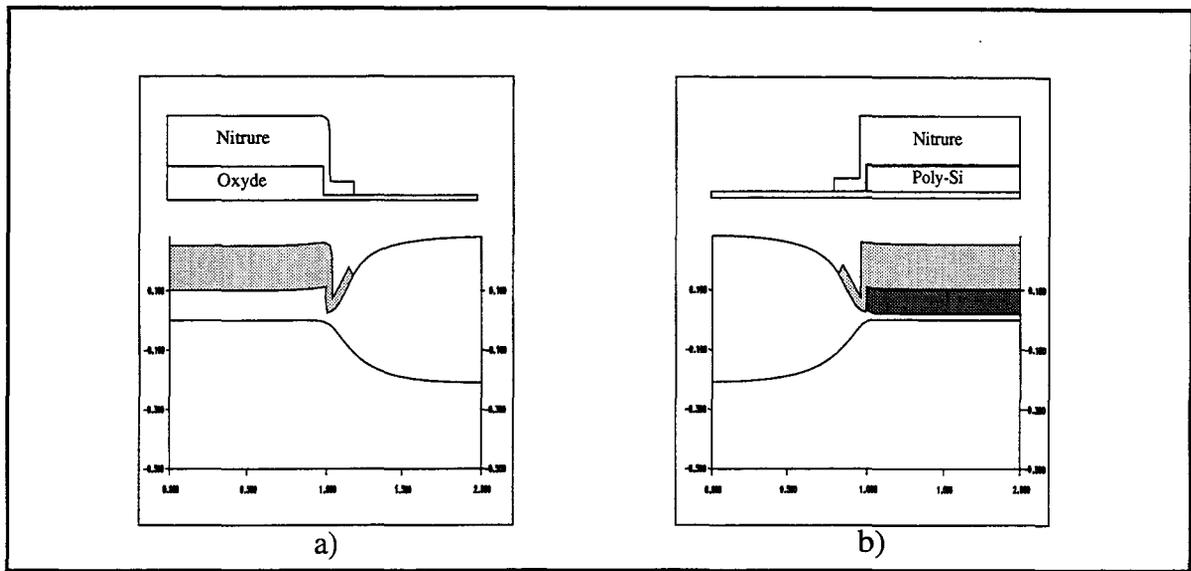


Figure 43 : Configuration initiale du masque d'oxydation et forme d'oxyde simulée pour : a) un LOCOS , b) un PBL, avec espaceurs de nitrure, fabriqués en ambiance humide à 1000°C, pendant 85 minutes.

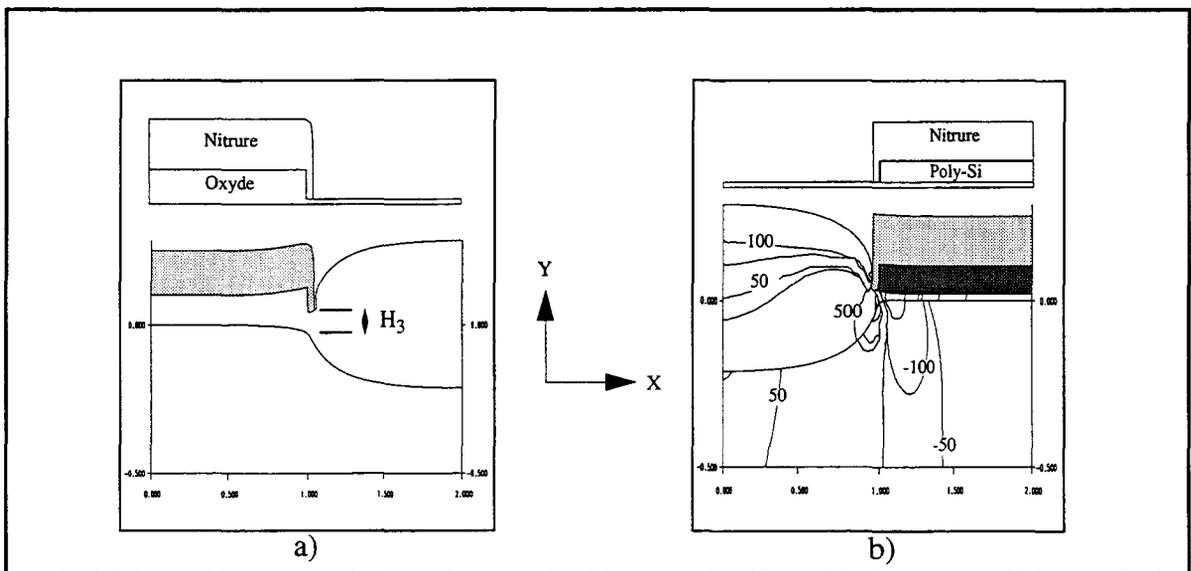


Figure 44 : Configuration initiale du masque d'oxydation et forme d'oxyde simulée pour : a) un LOCOS "encadré", b) un PBL "encadré", fabriqués en ambiance humide à 1000°C, pendant 85 minutes. Le cas b) est donné avec la distribution de la pression hydrostatique en MPa.

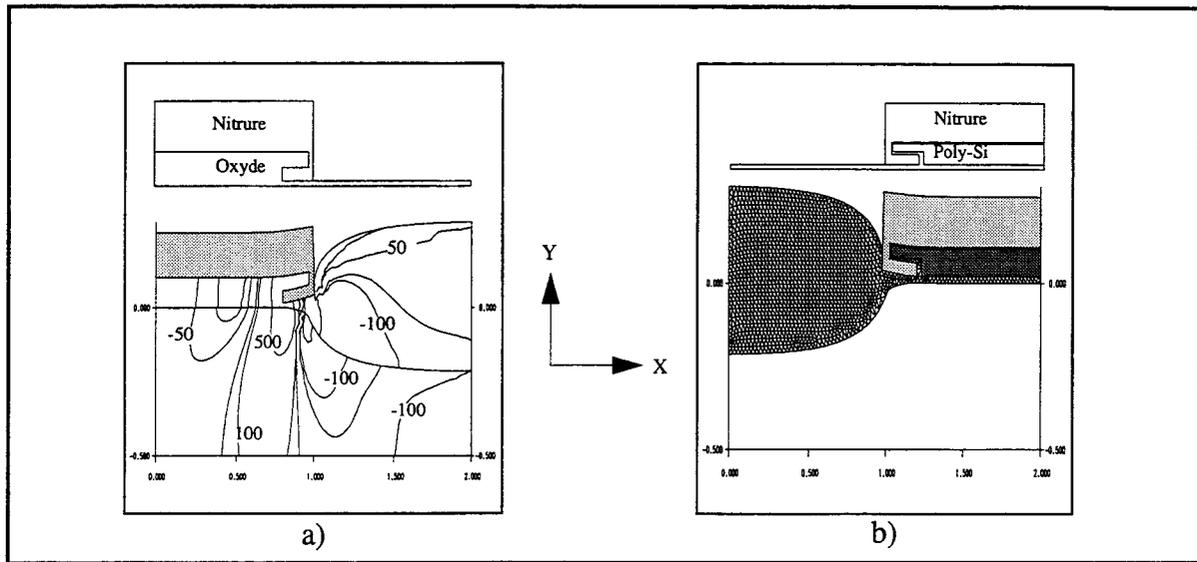


Figure 45 : Configuration initiale du masque d'oxydation et forme d'oxyde simulée pour : a) un LOCOS encapsulé, b) un PBL encapsulé, fabriqués en ambiance humide à 1000°C, pendant 85 minutes. Le cas a) est donné avec la distribution des contraintes normales dans la direction Y en MPa.

Une deuxième solution consiste à encadrer le masque d'une fine couche de nitrure dont le rôle est de minimiser la diffusion des oxydants sous le masque. Il s'agit des dispositifs dits : "Framed LOCOS" et "Framed PBL" (figure 44) [16].

La qualité de cet encadrement est nettement améliorée par la formation de cavités sous le nitrure qui permettent d'encapsuler le masque d'oxydation (figures 45). Deux matériaux sont utilisables pour l'encapsulation : le nitrure [17, 18 et 19] et le polysilicium [20, 21, 22], dans ce dernier cas, on parle de structures PELOX (Poly-encapsulated LOCOS). L'élaboration des encapsulations à partir du nitrure est technologiquement plus simple. De plus, le très faible rendement de l'oxydation du nitrure permet à la cavité de garder une meilleure intégrité. C'est pourquoi cette technique est préférable aux structures dites PELOX.

A l'aide du modèle complet, une comparaison des structures encadrées et encapsulées pour les techniques d'isolation LOCOS et PBL a été réalisée. Le but est d'évaluer la capacité des masques à s'opposer au perçage de l'oxyde apparaissant pour

de faibles longueurs. Le paramètre géométrique de contrôle est la hauteur du bec d'oiseau, H_3 , définie à la figure 44. Les résultats de simulation indiquent que les structures encapsulées sont plus résistantes à ce phénomène que leurs équivalentes "encadrées" (figure 46).

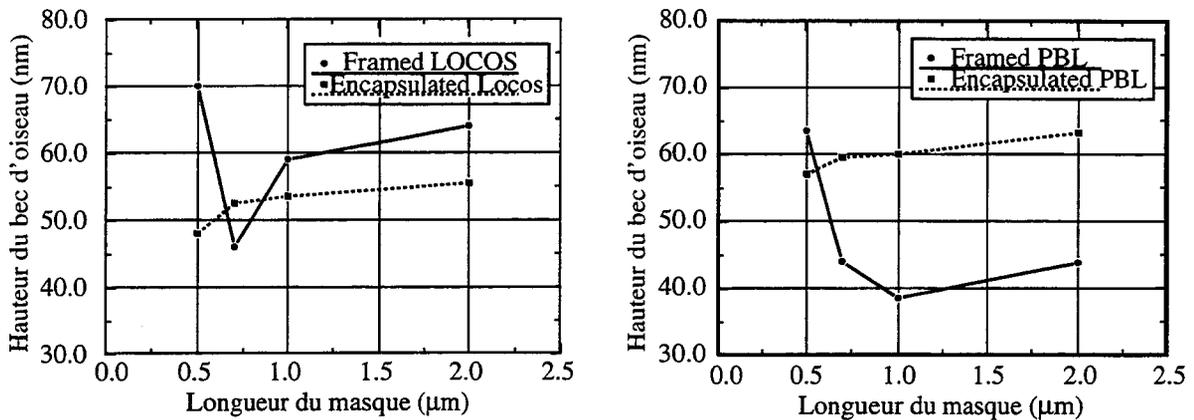


Figure 46 : Variation de la hauteur du bec d'oiseau, H_3 , en fonction de la longueur du masque d'oxyde pour des techniques "Framed" et "Encapsulated" de LOCOS et PBL.

3. ETUDE ELECTRIQUE

Les résultats qui ont été présentés jusqu'ici sont relatifs à la simulation des procédés d'oxydation proprement dits. Les modèles et méthodes numériques permettent d'optimiser les aspects géométriques des structures d'isolation en incluant les contraintes mécaniques induites par l'oxydation. Pour être un outil complet d'optimisation, la simulation doit également prédire le comportement électrique de ces structures. Tel est l'objet de cette dernière partie.

L'efficacité d'isolation est déterminée par les caractéristiques électriques du transistor MOS parasite réalisé dans la zone de champ (figure 47a). Les zones de source et de drain correspondent à celles des dispositifs actifs et la polarisation de grille est apportée par une ligne de connexion placée sur l'oxyde épais. Dans le cadre d'une étude commune, de telles structures furent réalisées au laboratoire de micro-électronique de l'Université catholique de Louvain-la-Neuve (UCL, Belgique). Les mesures de ces dispositifs particuliers servent de base de validation au couplage entre les simulations de technologies et de dispositifs.

3.1 Procédé technologique [23]

Le procédé de base correspond à une technologie CMOS ayant un niveau de grille en polysilicium et un niveau de métallisation. Deux types d'isolations ont été comparés : une structure LOCOS classique, semi-enterrée et un LOCOS enterré. Les étapes spécifiques sont :

- Substrat type p.
- Pad SiO_2 : 50 nm.
- Dépôt Si_3N_4 : 150 nm.
- Lithographie / gravure SiO_2 et Si_3N_4 .
- Gravure Si : 300 nm.
- Implantation B: 25 keV, $2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.
- Oxydation de champ.
- Gravure Si_3N_4 et SiO_2 .
- Oxydation de grille: 90 mn à 950° .
- Dépôt de polysilicium et dopage.
- Lithographie / gravure Si-poly.
- Implantation S/D : As 140 keV, $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}$.
- Recuit S/D 950°C .
- Dépôt et densification PSG : 500 nm.
- Dépôt Al.

Le substrat de silicium orienté $\langle 100 \rangle$, uniformément dopé en bore (10^{15} cm^{-3}), subit une fine oxydation thermique suivie d'un dépôt LPCVD de nitrure. Ce bicouche, servant de masque d'oxydation, est gravé afin de dégager les zones de champ. Pour la structure LOCOS enterrée seule, le silicium est gravé chimiquement (KOH), les zones actives étant protégées par le nitrure. Le bore est implanté afin d'augmenter la tension de seuil des zones de champ (dopage d'anti-canal). Les tranches sont ensuite oxydées en ambiance humide afin de faire croître un oxyde de 800 nm. Pour la

structure LOCOS semi-enterrée, cette oxydation s'effectue à 1000° (220 minutes), tandis qu'une température plus faible est choisie pour la structure enterrée (950°C, 370 minutes). Après le décapage du nitrure et des 50 nm d'oxyde initial, l'oxydation de grille est réalisée en ambiance sèche (35 nm) suivie du dépôt et du dopage (950°C, 65 minutes) de la grille en polysilicium. Les zones de source et de drain sont implantées en arsenic et activées à 950°C (25 minutes). Une couche de 500 nm de verre PSG (phospho-silicate-glass) est ensuite déposée sur toute la structure et densifiée (950°C, 20 minutes). Enfin, un niveau d'interconnexion en aluminium est réalisé, faisant office de grille pour les transistors parasites. La figure 47 donne une vue en coupe des deux structures d'oxyde après le décapage du nitrure.

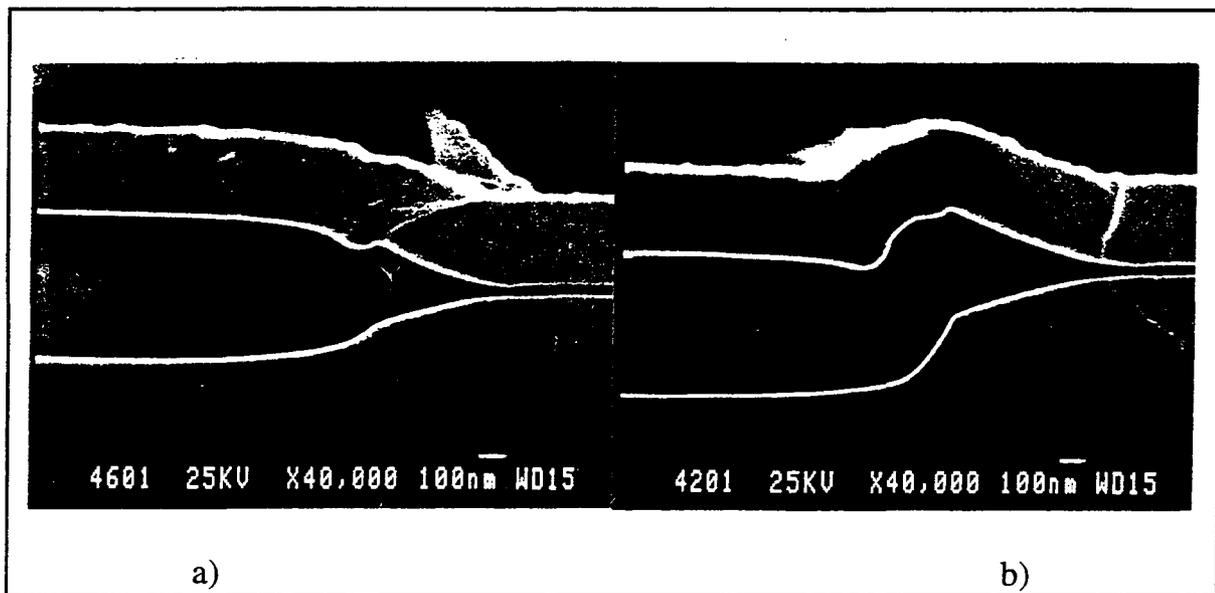


Figure 47 : Photographies SEM des deux types de structures d'isolation servant de base à l'étude des transistors parasites : (a) LOCOS semi-enterré, (b) LOCOS enterré [23].

3.2 Résultats de simulation

L'approche incomplète est utilisée pour cette étude. Les résultats de la simulation de technologie obtenus pour la structure LOCOS semi-enterrée sont présentés en figure 48, à l'issue de l'implantation d'arsenic de source et de drain. La forme de l'oxyde ne subit pas de pincement lié aux contraintes introduites par le nitrure, ce qui est tout à fait conforme à la photographie SEM correspondante (figure 47a). Le profil de dopage d'anti-canal montre une très forte exo-diffusion de bore du silicium vers l'oxyde, résultant de la faible valeur du coefficient de ségrégation à l'interface ($m \sim 0.3$).

La structure du transistor parasite complet, figure 49, est obtenue par symétrie et translation du résultat de simulation de technologie [24]. Les contacts de source et de drain du transistor parasite sont pris sur les zones n+ de part et d'autre de l'oxyde d'isolation. La polarisation de grille est imposée sur la surface supérieure du verre PSG qui recouvre l'oxyde de champ sur toute la largeur de la structure. La polarisation de substrat est, quant à elle, appliquée en face arrière du domaine de simulation. L'ouverture du masque de nitrure détermine la longueur du dispositif, L, et, finalement, la largeur des dispositifs expérimentaux a été fixée à 100 μm .

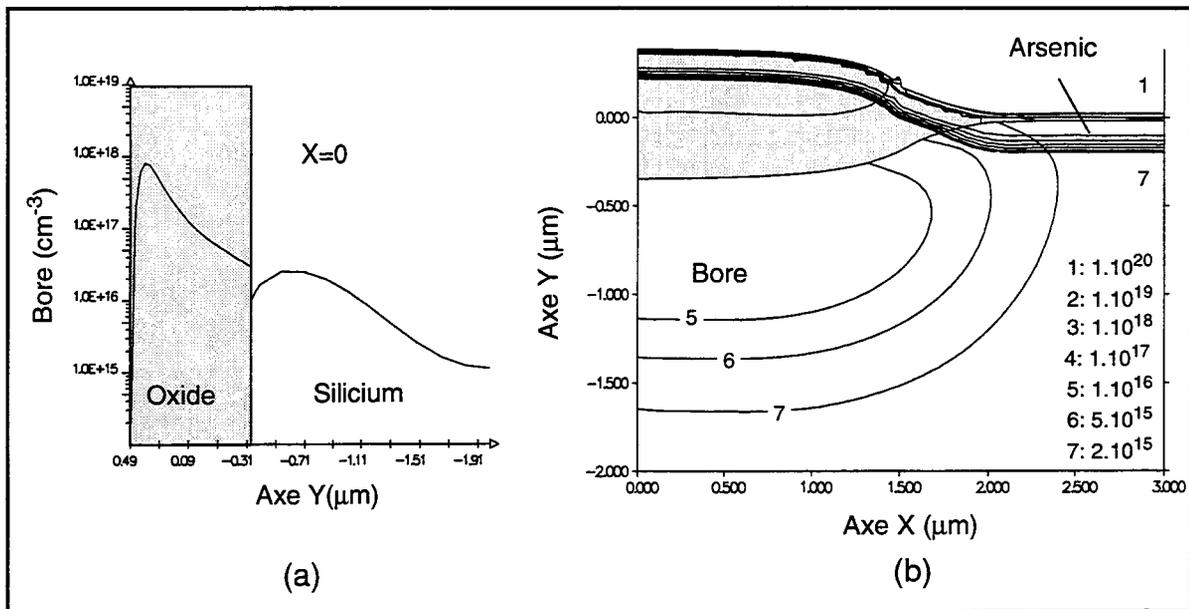


Figure 48 : Profil de dopage simulé pour le procédé LOCOS semi-enterré à l'issue de l'implantation d'arsenic : a) profil de dopage en coupe dans la zone de champ, b) tracé d'iso-concentrations d'arsenic et de bore.

Le simulateur de dispositifs IMPACT-3 est ici mis en oeuvre pour calculer les caractéristiques électriques des transistors parasites. Bien que ce simulateur soit basé sur une méthode d'intégration de boîtes finies rectangulaires, les diagonales des cellules élémentaires peuvent être exploitées afin de définir des interfaces obliques. Un ensemble de points clés est d'abord déduit des résultats de la simulation de technologie: taille du domaine de simulation, positions extrêmes des interfaces, intersection des jonctions avec les interfaces, position et taille des contacts. A partir de ces points clés,

une grille non-uniforme est générée (en X et Y). La topologie des interfaces est ensuite déterminée au mieux en utilisant les côtés et les diagonales des cellules élémentaires rectangulaires [24]. Cette méthode élimine les problèmes de discrétisation introduits par les angles obtus des maillages triangulaires et permet de reproduire correctement des topologies non-planes comme le prouve la forme discrétisée de l'oxyde de champ en figure 49. Les caractéristiques électriques sont ensuite calculées à partir du modèle de dérive-diffusion statique dans lequel l'équation de Poisson et les équations de continuité sont résolues de manière découplée [25].

Un résultat typique de simulation de dispositifs sur la structure LOCOS semi-enterrée est donné en figure 49. La polarisation de grille importante, $V_G=25$ V, permet ici la formation du canal parasite comme le montre la distribution du potentiel et la densité électronique.

Les caractéristiques complètes, $I_D=f(V_G)$, calculées pour deux longueurs différentes de dispositifs ($L=16$ μm et $L=4$ μm) sont reportées en figure 50. Les valeurs des courants diffèrent pour les deux longueurs de canal, indiquant que le comportement est ici comparable à celui d'un transistor plan. En effet, la transition douce oxyde épais / oxyde fin ne permet pas la création d'une barrière de potentiel importante le long de l'interface Si/SiO₂ [26]. La figure 50 met en évidence également un excellent accord entre les résultats de simulation et les mesures électriques pour le dispositif ayant une longueur de 16 μm . Cet accord valide totalement la simulation de technologie à deux titres:

- la caractéristique sous le seuil ($V_G < 20$ V) valide le profil de bore dans le canal et donc le calcul relatif à la ségrégation des dopants aux frontières mobiles.
- la caractéristique en conduction ($V_G > 20$ V) confirme la forme correcte de l'oxyde et la localisation des zones implantées en arsenic.

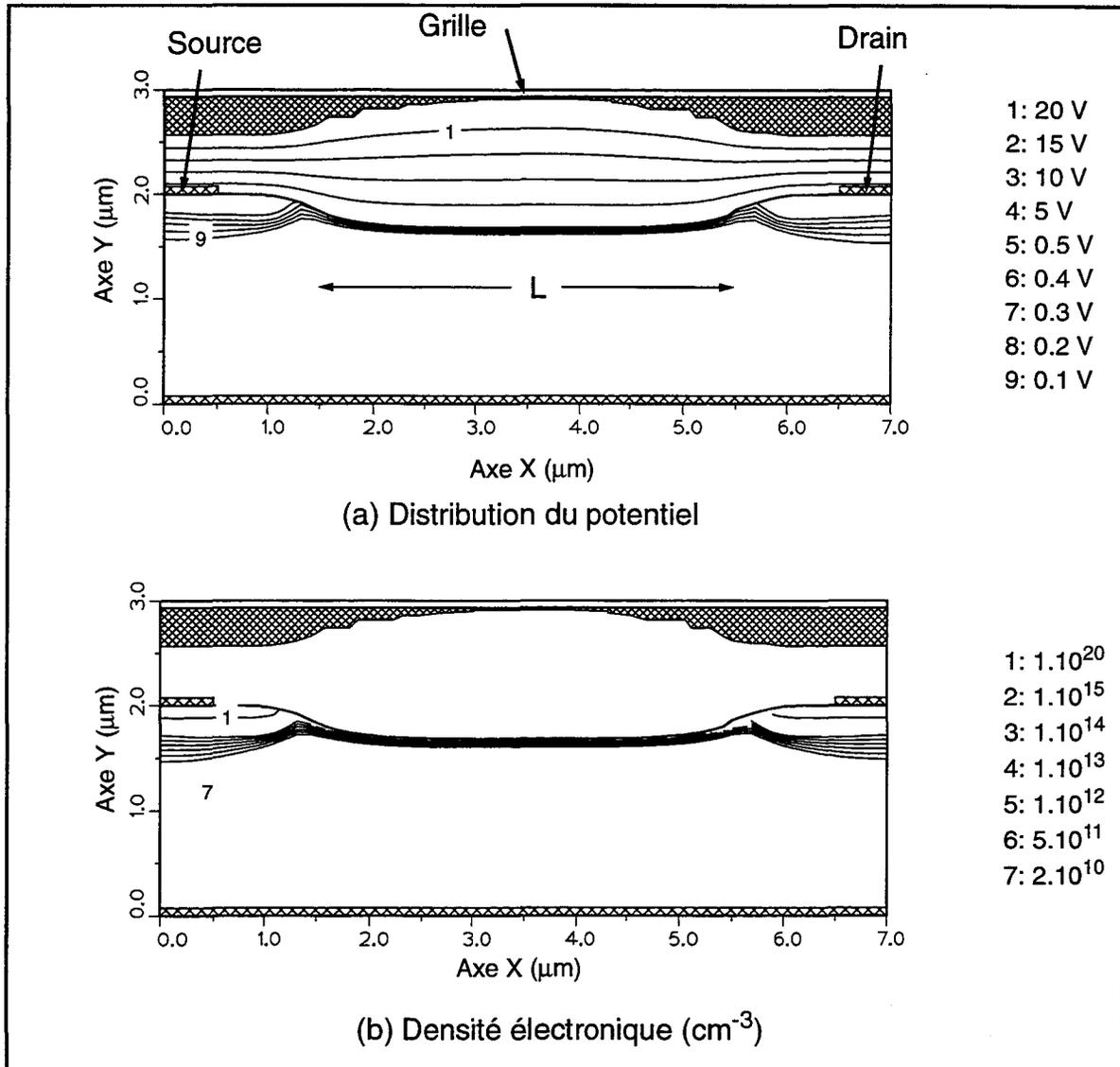


Figure 49 : Résultats de simulation d'un transistor MOS parasite sur LOCOS semi-enterré. La longueur du dispositif simulé est de 4 μm , la polarisation est donnée par $V_S=V_B=0\text{V}$, $V_D=50\text{ mV}$ et $V_G=25\text{V}$. (a) Tracé de courbes iso-potentiellles. (b) Tracé d'iso-concentrations d'électrons indiquant clairement la formation d'un canal.

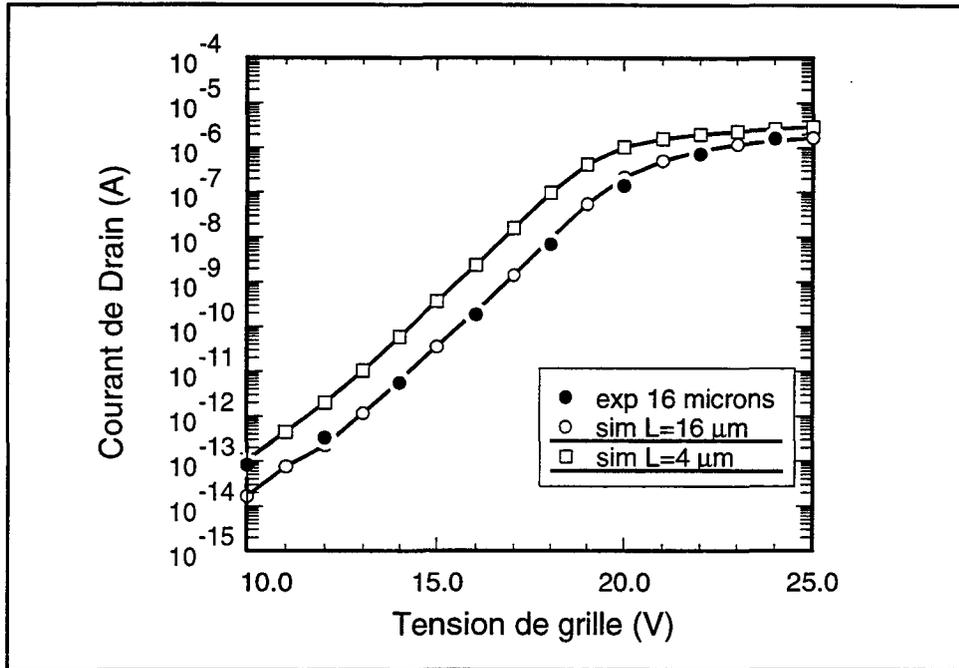


Figure 50 : Caractéristiques $I_D=f(V_G)$ du transistor parasite correspondant à la structure LOCOS semi-enterrée. $V_S=V_B=0V$ et $V_D=50 mV$.

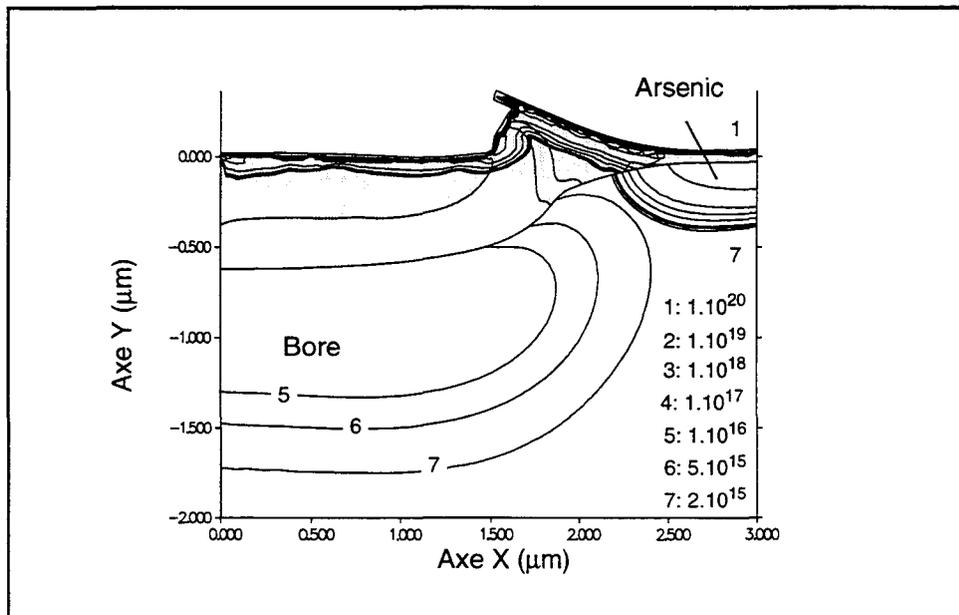


Figure 51 : Résultat de simulation de la structure LOCOS enterrée indiquant les iso-concentrations de dopants. Ce résultat est obtenu à l'issue du recuit de source et de drain.

La même démarche de simulation à été menée pour le procédé incluant la structure LOCOS enterrée. Le profil de dopage calculé après le recuit de source et de drain est tracé en figure 51. L'oxydation réalisée à 950°C introduit un niveau de contraintes suffisamment élevé pour créer un pincement assez marqué dans la topologie d'oxyde, ce pincement est également bien net sur la photographie électronique de la figure 47b.

Pour les deux mêmes longueurs que précédemment, $L=4$ et $16\ \mu\text{m}$, la figure 52 donne les caractéristiques électriques obtenues pour les transistors parasites sur LOCOS enterré.

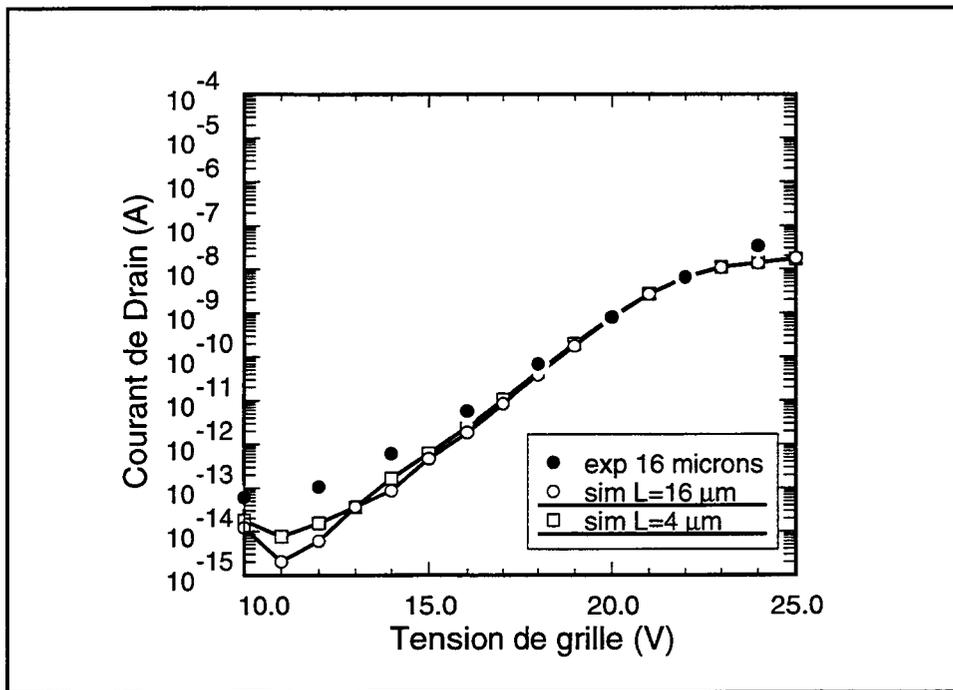


Figure 52 : Caractéristiques $I_D=f(V_G)$ du transistor parasite correspondant à la structure LOCOS enterrée pour $V_S=V_B=0\text{V}$ et $V_D=50\text{ mV}$.

Ces résultats indiquent que le courant est indépendant de la longueur du canal, il est donc limité par la barrière de potentiel créée par les coins convexes de l'oxyde [26]. Un accord correct existe entre les mesures et la simulation pour le dispositif de $16\ \mu\text{m}$. Cependant, la qualité de cet accord est moindre que celle obtenue pour le LOCOS semi-enterré dans la mesure où les valeurs des courants sont extrêmement sensibles à la barrière de potentiel et donc à la géométrie.

En relation avec l'étude géométrique du LOCOS enterré précédemment exposée, une étude en variation est ici proposée visant à quantifier l'influence de la gravure du silicium sur les performances électriques de la structure d'isolation. La topologie initiale du silicium est simulée avec trois modèles différents de gravure. Les résultats de simulations sont superposés, pour les trois cas, dans la figure 53, avant et après l'oxydation de champ. Lorsque la gravure latérale est importante, l'oxyde est déplacé vers la zone active et décale donc le dopage d'arsenic auto-aligné.

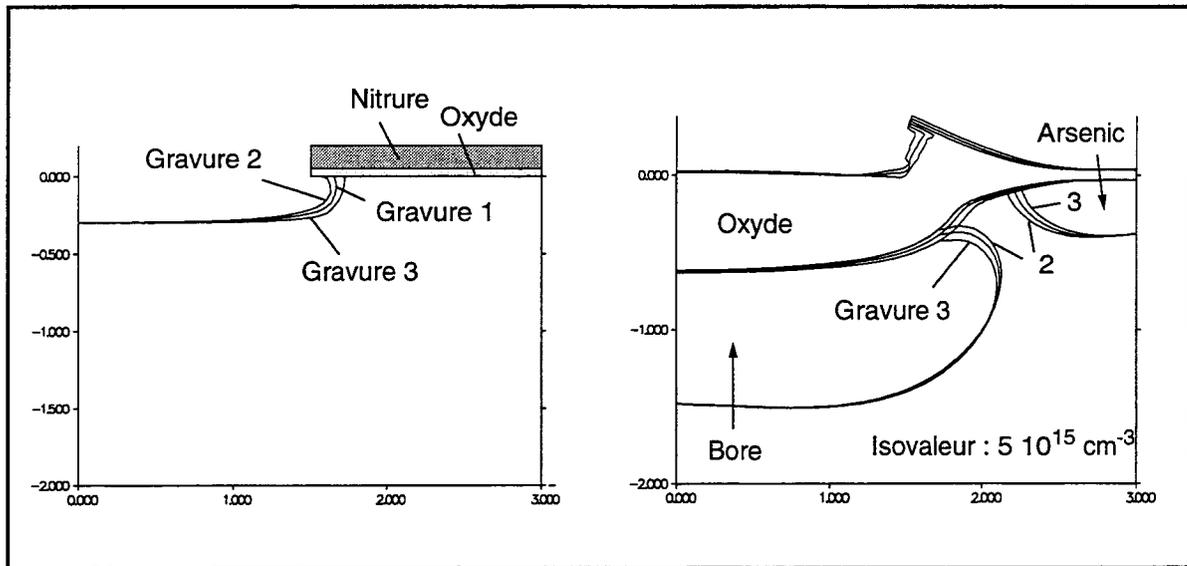


Figure 53 : Superposition des résultats de simulation de la structure LOCOS enterrée pour les trois gravures différentes. (a) Profils gravés avant l'oxydation de champ. (b) Formes finales d'oxyde et tracés d'iso-concentrations de bore et d'arsenic.

La redistribution de l'extrémité du profil d'anti-canal subit plus fortement l'effet de l'oxydation, ce qui se traduit par une réduction des concentrations de bore près de la partie convexe de l'oxyde. De ce fait, la barrière de potentiel est moins marquée et le courant du transistor parasite prend des valeurs plus importantes, comme le montrent les réseaux de caractéristiques de la figure 54.

Les résultats de simulation des dispositifs d'isolement dépendent de la redistribution des dopants lors des étapes d'oxydation et de la forme des oxydes locaux. Les accords corrects obtenus avec les mesures expérimentales pour ce type de structures peuvent donc, objectivement, faire office de validation globale des différentes modélisations et algorithmes développés dans le cadre de ce travail.

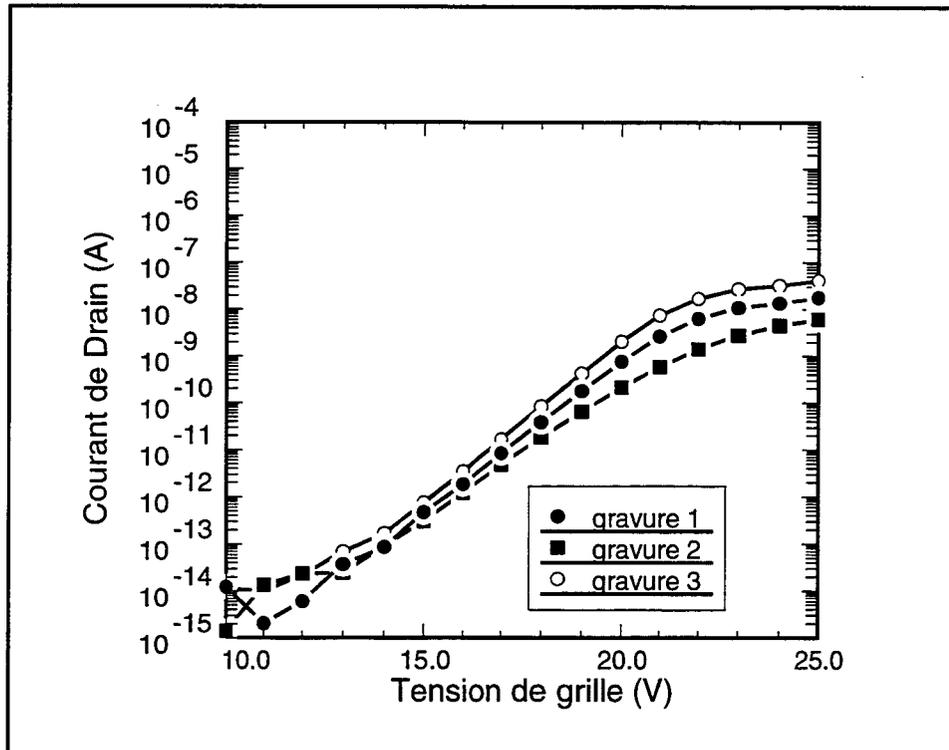


Figure 54 : Comparaison des caractéristiques $I_D=f(V_G)$ simulées pour les trois structures LOCOS enterrées correspondant aux différentes gravures. La longueur des transistors est de $16\ \mu\text{m}$, $V_S=V_B=0\text{V}$ et $V_D=50\ \text{mV}$.

Chapitre 5

Références bibliographiques

- [1] S. Yamamoto et al., "A Two-Dimensional Etching Profile Simulator : ESPRIT", IEEE Transactions on Computer-Aided-Design, vol. CAD-6, p. 417, 1987.
- [2] V. Senez, D. Collard, B. Baccus, M. Brault and J. Lebailly, "Analysis and Application of a Viscoelastic Model for Silicon Oxidation", Journal of Applied Physics, vol. 76, no. 6, p. 3285, 1994.
- [3] E. Bassous, H.N. Yu and V. Maniscalco, "Topology of Silicon Structures with Recessed SiO₂", Journal of the Electrochemical Society, vol. 123, no. 11, p. 1729, 1976.
- [4] J. Hui, P. Vande Voorde and J. Moll, "Scaling Limitations of Submicron Local Oxidation Technology", Proceedings of the IEDM 85, p. 392, 1985.
- [5] T. Mizuno, S. Sawada, S. Maeda and S. Shinozaki, "Oxidation Rate Reduction in the Submicrometer LOCOS Process", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 34, no. 11, p. 2255, 1987.
- [6] J.W. Lutze, A.H. Perera and J.P. Krusius, "Field Oxide Thinning in Poly Buffer LOCOS Isolation with Active Area Spacings to 0.1 μm ", Journal of the Electrochemical Society, vol. 137, p. 1867, 1990.
- [7] B. Coulman, C. Aussems, P.A. Van Den Plas and N. Wils, "LOCOS Isolation for ULSI", Proceedings of the 2nd international symposium on ULSI science and technology, p. 759, 1989.

- [8] M. Brault, Private Communication, Philips Caen, February 1993.
- [9] V. Senez, D. Collard, P. Ferreira and B. Baccus, "Simulation of Advanced Field Isolation using Calibrated Viscoelastic Stress Analysis", to be published in the Proceedings of the IEDM 94, December 1994.
- [10] D. Collard, V. Senez, B. Baccus, "Two-Dimensional Modelling of SILO Isolation Structures", Proceedings of ESSDERC'93, p. 163, 1993.
- [11] A. Poncet, "Finite Element Simulation of Local Oxidation", IEEE Transaction on Computer-Aided-Design, vol. CAD-4, p. 41, 1985.
- [12] P. Molle, S. Deleonibus and F. Martin, "Sealed Interface Local Oxidation by Rapid Thermal Nitridation", Journal of the Electrochemical Society, vol. 138, p. 3733, 1991.
- [13] M. Ghezzi, E. Kaminsky, Y. Nissan-Cohen, P. Frank and R. Saia, "LOPOS : Advanced Device Isolation for 0.8 mm CMOS/BULK Process Technology", Journal of the Electrochemical Society, vol. 136, no. 7, p. 1992, 1989.
- [14] J. Nagel, M. Reiche, S. Hopfe and D. Katzer, "Stress-Induced Void Formation in Inter-level Polysilicon Films during Polybuffered Local Oxidation of Silicon", Journal of the Electrochemical Society, vol. 140, p. 2356, 1993.
- [15] S. Deleonibus, "A GIGABIT scalable SILO field isolation using Rapid Thermal Nitridation (RTN) of Silicon", Proceedings of ESSDERC'92, p. 75, 1992.
- [16] V.M.H. Meyssen and A.H. Montree, "Framed Poly Buffer LOCOS Technology for 0.35 mm CMOS", Proceedings of ESSDERC'93, p. 257, 1993.
- [17] J.M. Sung, C.Y. Lu, L.B. Fritzinger, T.T. Sheng and K.H. Lee, "Reverse L-Shape Sealed Poly-Buffer LOCOS Technology", IEEE Electron Device Letters, vol. 11, no. 11, p. 549, November 1991.
- [18] J.R. Pfister, P.U. Kenkare, R. Subrahmanyam, J.-H. Lin and P. Crabtree, "Nitride-Clad LOCOS Isolation for 0.25 μ m CMOS", 1993 Symposium on VLSI Technology-Kyoto, p. 139, May 1993.
- [19] N.A.H. Wils and A.H. Montree, "A New Sealed Poly Buffer LOCOS Isolation Scheme", Proceedings of ESSDERC'91, p. 643, 1991.
- [20] S.S. Roth, W. Ray, C. Mazure and H. C. Kirsch, "Polysilicon Encapsulated Local Oxidation", IEEE Electron Device Letters, vol. 12, no. 3, p. 92, March 1991.
- [21] P.U. Kenkare, C. Mazure, J.D. Hayden, J.R. Pfister, J. Ko, H.C. Kirsch, S.A. Ajuria, P. Crabtree and T. Vuong, "Scaling of Poly-Encapsulated LOCOS for 0.35 μ m CMOS Technology", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 41, no. 1, p. 56, January 1994.

[22] S.S. Roth, K.J. Cooper, H.C. Kirsch, W. Ray, L. Hendrix and G. Simon, "PELOX Integrated PBL", IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing, vol. 6, no. 3, p. 246, August 1993.

[23] J.L. Coppee and F. Vandewiele, "Experimental Study of the Electrical Performances of Isolation Structure", IEEE Electron Device Lett., vol. EDL-9, p. 536, 1988.

[24] E. Dubois, "Simulation Bidimensionnelle de Dispositif Silicium : Contribution à l'Etude de Phénomènes Parasites en Technologie MOS et bipolaire", Thèse présentée à l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres-Artois, n° d'ordre 519, Mai 1990.

[25] E. Dubois, B. Baccus, D. Collard and D. Morel, "IMPACT-3.3 User's guide", IEMN Dept. ISEN, Lille, France, January 1991.

[26] S.H. Goodwin and J.D. Plummer, "Electrical Performance and Physics of Isolation Region Structures for VLSI" IEEE Transactions on Electron Device, vol. ED-31, p. 1033, 1984.

Chapitre 6

onclusion et perspectives

La miniaturisation des dispositifs micro-électroniques élémentaires reste encore à ce jour le meilleur moyen d'améliorer les performances des circuits intégrés. Dans cette perspective, un effort important est consacré à la minimisation des surfaces d'isolation qui représentent plus de 50 % de la surface totale d'un circuit. Cette isolation électrique est réalisée au moyen de trois types de procédés : 1) le remplissage de caissons gravés peu profondément dans le silicium par un dioxyde de silicium, 2) l'élaboration de structures de type "tranchée" qui consiste à inclure profondément un matériau diélectrique dans le substrat et 3) la croissance thermique d'un oxyde épais. Les deux premières techniques possèdent une complexité importante liée d'une part, aux procédés de déposition qui ont des difficultés à assurer un remplissage correct et une bonne planarité pour des structures submicroniques et d'autre part, à la nature fortement non-plane des structures qui favorise la génération de dislocations dans le substrat. C'est pourquoi, l'oxydation localisée du silicium ou LOCOS et ses améliorations (PBL, SILO), dont la technologie est d'une simplicité beaucoup plus grande, restent majoritairement employées dans l'industrie des semi-conducteurs.

Cependant, leur adaptation pour des dispositifs submicroniques se heurte à un problème d'optimisation complexe. En effet, la diminution des dimensions géométriques et des budgets thermiques, nécessaire à l'obtention de composants rapides, s'accompagne d'une augmentation du niveau des contraintes mécaniques dans l'ensemble des matériaux de fabrication. Ce phénomène augmente les risques de création de défauts cristallins dans le substrat. Le meilleur compromis doit permettre de concevoir une structure de taille la plus réduite possible tout en minimisant les effets

des contraintes mécaniques. Afin de réduire les coûts et la durée de conception de ce dispositif optimal, l'utilisation de la simulation de technologies est indispensable. Le travail rapporté dans ce manuscrit contribue à améliorer les capacités de prédiction de cet outil en intégrant une modélisation bidimensionnelle physique avancée de l'oxydation du silicium.

Sur la base d'une extension 2D du modèle de Deal et Grove, deux approches ont été développées qui permettent de résoudre successivement la diffusion des agents oxydants à travers l'oxyde et la déformation de la structure résultant de la croissance de l'oxyde. Une solution incomplète considère que les matériaux oxydés (silicium et polysilicium) sont infiniment rigides et donc ne se déforment pas. L'approche complète calcule les déformations de l'ensemble des matériaux. Un comportement mécanique purement élastique est affecté aux matériaux oxydés, par contre, une loi comportementale viscoélastique non-linéaire est introduite pour l'oxyde et le nitrure. Pour ces deux modélisations, les effets des contraintes sur la cinétique d'oxydation sont pris en compte et se traduisent par une réduction de la diffusivité des oxydants dans un état de compression de l'oxyde et par une réduction du coefficient de réaction de la cinétique lorsque des contraintes normales en compression agissent sur la surface du matériau oxydé. La calibration de ces effets et du comportement viscoélastique non-linéaire de l'oxyde et du nitrure a été réalisée pour une large gamme de température, grâce à la mise au point d'une procédure de calibration originale. Enfin, l'étude des différents types de comportements rhéologiques a permis de mettre en évidence l'équivalence des modèles non-linéaires viscoélastiques et visqueux dans certains cas technologiques (haute température, ambiance humide). Cependant, à basse température ou en ambiance sèche, l'utilisation du comportement viscoélastique non-linéaire est indispensable.

La simulation est réalisée par la méthode des éléments finis qui discrétise les équations non-linéaires de diffusion et d'équilibre des forces. L'assemblage "élément fini" est basé sur la technique des résidus pondérés et la méthode de Galerkin. Une méthode de gradients conjugués résout le système linéaire résultant de la discrétisation de l'équation de diffusion, par contre une méthode de Gauss directe est appliquée au problème mécanique. Les non-linéarités de ces deux équations sont traitées par une procédure de sous-relaxation dynamique des contraintes. Enfin, étant donné les modifications géométriques importantes, résultat de l'expansion de volume du nouvel oxyde, le remaillage systématique de la structure est effectué, qui préserve une bonne qualité du maillage et l'exactitude des calculs.

La validation de l'ensemble des algorithmes développés dans le cadre de cette modélisation est apportée par les bons accords obtenus entre la simulation et les résultats expérimentaux pour : 1) les formes d'oxyde de structures LOCOS diverses (LOCOS semi-enterré, LOCOS enterré, SWAMI, PBL, SILO), 2) le phénomène d'amincissement de l'oxyde de champs dans des structures LOCOS et SILO, 3) le phé-

nomène de perçage du bec d'oiseau pour des masques étroits de structures LOCOS, 4) l'oxydation de structures cylindriques concaves et convexes (Kao) et 5) le comportement électrique d'un transistor MOS parasite sur oxyde épais obtenu à partir de LOCOS semi-enterré et enterré. Ces excellents résultats permettent d'utiliser la modélisation pour analyser l'isolation par LOCOS enterré d'une technologie industrielle BIC-MOS 0.8 μm (Philips Caen). Enfin, l'étude d'un dispositif SILO a permis de réaliser une corrélation entre le calcul des contraintes dans le silicium et l'observation expérimentale de défauts cristallins. Ce dernier résultat est particulièrement important puisqu'il constitue une première approche dans l'étude de l'influence des conditions du procédé sur la génération de dislocations.

Ce travail constitue une première étape vers le calcul mécanique systématique permettant aux simulateurs de technologies de calculer l'évolution spatiale et temporelle des champs de contraintes au même titre que celle des dopages. Pour atteindre cet objectif, il est nécessaire dans un premier temps d'introduire d'une part le calcul des contraintes intrinsèques aux matériaux et d'autre part, celui des contraintes liées aux chocs thermiques [1]. Dans cette perspective, la modélisation et la calibration de lois rhéologiques complexes sont souhaitables pour l'ensemble des matériaux de la technologie silicium.

Cet objectif est en concordance avec les conclusions de l'étude du comportement d'une structure PBL qui a révélé la nécessité de modéliser plus précisément le comportement mécanique du polysilicium en couche mince. En effet, une loi élastique ne permet pas de distinguer les configurations topologiques générant un niveau de contraintes très élevé, c'est à dire conduisant, expérimentalement, à la formation de défauts cristallins dans le substrat. Le développement de la spectroscopie micro-Raman [2] pour obtenir une caractérisation de l'état de contraintes résiduelles dans le substrat après une étape d'oxydation doit permettre d'affiner l'exactitude de la modélisation des contraintes [3,4,5 et 6]. En effet, bien que cette technique souffre encore d'une résolution spatiale insuffisante, elle fournit une information quantitative précieuse jusqu'ici inexistante. L'intégration de ces résultats dans une procédure de calibration est fortement souhaitable afin d'obtenir une extraction directe des paramètres du modèle. Dans ce cadre, la prise en compte de la plasticité du silicium peut se révéler nécessaire [7 et 8].

Le calcul des contraintes dans le silicium ainsi que leur calibration va permettre désormais d'envisager l'étude d'un modèle de génération et d'évolution des dislocations dans le substrat de silicium. Ce sujet fait le lien entre les modélisations de la diffusion des dopants et de l'oxydation du silicium. En effet, il a été observé expérimentalement que les défauts étendus affectent la cinétique de diffusion des dopants [9]. Quelques modélisations de ces phénomènes ont été rapportées [10 et 11] qui démon-

trent la nécessité d'une formulation générale de la cinétique d'évolution des dislocations. L'amélioration de nos connaissances dans ce domaine doit contribuer à définir plus précisément les conditions technologiques permettant d'augmenter la fiabilité des circuits intégrés submicroniques.

En parallèle, deux axes de recherche sont en pleine évolution qui doivent pouvoir bénéficier des acquis de la simulation bidimensionnelle de technologie silicium. Il s'agit d'une part de la conception d'outils 3D de simulation de procédés technologiques [12], absolument nécessaires étant donné l'importance croissante des comportements tri-dimensionnels des composants submicroniques.

D'autre part, l'essor des micro-technologies a fait apparaître des besoins importants en simulation [13]. Or, l'élaboration des micro-systèmes se basent très largement sur le savoir faire acquis en technologie des circuits intégrés. Par conséquent, la C.A.O. dédiée à l'optimisation de ces nouvelles applications doit profiter au maximum des connaissances en simulation numérique de technologie silicium pour devenir opérationnelle au plus vite.

Chapitre 6

Références bibliographiques

- [1] P. Ferreira, "Simulation de problèmes mécaniques dans les structures intégrées.", Thèse en préparation à l'IEMN pour une présentation à l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres-Artois.
- [2] W.J. Rothwel, C. Hill and P.J. Pearson, ICORS XIII, Wurzburg, Ed. Kiefer, Cardona, Schaack, Schneider, Schrotter (J. Wiley&Sons) England, 1992.
- [3] I. De Wolf, H.E. Maes and K. Yallup, "Raman Spectroscopy Measurement of Local Stress Induced by LOCOS and Trench Structures in the Silicon Substrate", Proceedings of ESSDERC'93, p. 565, 1993.
- [4] H. Miura, H. Sakata and S. Sakata, "Residual Stress Measurement in Silicon Substrate after Local Thermal Oxidation using Microscopic Raman Spectroscopy", Proceedings of the Material Research Society Symposium, vol. 226, p. 345, 1991.
- [5] I. De Wolf, J. Vanhellefont, A. Romano-Rodriguez, H. Norström and H. E. Maes, "Micro-Raman Study of Stress Distribution in Local Isolation Structures and Correlation with Transmission Electron Microscopy", Journal of Applied Physics, vol. 71, no. 2, 15 January 1992.
- [6] S.K. Jones, M. Ahmed, W.J. Rothwell, I. De Wolf and L. Deferm, "Characterisation of Mechanical Stress in Advanced PBL Isolation", Proceedings of ESSDERC'94, p. 255, 1994.
- [7] J. R. Patel and A. R. Chaudri, "Macroscopic Plastic Properties of Dislocation-Free Germanium And Other Semiconductor Crystals. I. Yield Behavior", Journal of Applied Physics, vol. 34, p. 2788, September 1963.

- [8] T. Uchida, N. Kotani, K. Kobayashi, Y. Mashiko and N. Tsubouchi, "A Simulation of Plastic Deformation of Silicon During Thermal Oxidation", Proceedings of the IEDM'93, p. 315, 1993.
- [9] M. Orłowski, "Impurity and Point-Defect Redistribution in the Presence of Crystal Defects", Proceedings of the IEDM 90, p. 729, 1990.
- [10] H. Park, K.S. Jones and M.E. Law, "A Point Defect Based Two Dimensional Model of the Evolution of Dislocation Loops in Silicon During Oxidation", Journal of the Electrochemical Society, vol. 141, p. 749, 1994.
- [11] E. Vandenbossche, "Contribution à la Modélisation de la Diffusion des Dopants en Fortes Concentrations dans le Silicium", Thèse présentée à l'Université des Sciences et Technologies de Lille, no. d'ordre 1391, Novembre 1994.
- [12] Process Optimization in Multiple Dimensions for Semiconductor Technology (PROMPT), Projet JESSI BT8B/ESPRIT 8150.
- [13] Dominique Collard, "Contribution à la simulation de technologies et de dispositifs Silicium", Mémoire d'habilitation à diriger des recherches, présenté à l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres-Artois, Décembre 1994.

Liste des figures

Chapitre 1 Introduction

- Figure 1 : Coupe schématique d'un dispositif BICMOS avancé. Page : 14
- Figure 2 : Evolution historique des dimensions des dispositifs d'isolation : a) longueur de l'isolation, b) rapport de la surface d'isolation sur la surface totale du dispositif. Page : 17
- Figure 3 : Isolation latérale par oxyde épais dite LOCOS. Page : 18
- Figure 4 : Procédés d'isolation a) "direct moat" et b) SEPOX. Page : 18
- Figure 5 : Amélioration du procédé LOCOS : a) introduction d'un buffer de polysilicium et épaissement du masque de nitrure (PBL), b) Scellement parfait de l'interface Si/SiO₂ (SILO). Page : 19
- Figure 6 : LOCOS enterré : structure initiale et après oxydation. Page : 20
- Figure 7 : Procédé SWAMI : LOCOS enterré + Masquage des flancs. Page : 21
- Figure 8 : Isolation par Tranchée : a) structure après oxydation thermique de l'interface et remplissage par du polysilicium, b) structure finale après réoxydation de surface. Page : 22
- Figure 9 : Procédés a) S.E.G. et b) S.I.M.O.X. Page : 22

Figure 10 : Conception d'un dispositif d'isolation : visualisation et localisation des phénomènes de a) génération de contraintes mécaniques importantes b) perçage du bec d'oiseau et c) amincissement de l'oxyde. Page : 24

Chapitre 2 Modélisation

Figure 1 : Trois mécanismes possibles pour la cinétique d'oxydation pour lesquels la réaction se déroule a) à l'interface Si/SiO₂ b) en surface du SiO₂ et 3) au sein du SiO₂. Page : 35

Figure 2 : Modèle unidimensionnel de Deal et Grove. Page : 36

Figure 3 : Structure du dioxyde de silicium au niveau de l'interface. Page : 40

Figure 4 : Schématisation du comportement des constantes a) parabolique, b) linéaire en fonction de la température. Page : 41

Figure 5 : Méthodes expérimentales de Kao : a) cylindre de silicium gravé anisotropiquement, b) coupe et vue de dessus de la structure et c) après oxydation [35]. Page : 43

Figure 6 : Comparaison entre des surfaces convexes et concaves d'après Kao : a) relevé SEM, b) schéma [35]. Noter la réduction d'oxydation qui est différente entre les angles convexes et concaves. Page : 43

Figure 7 : Définition des paramètres d'une structure LOCOS pour le modèle analytique 2D décrit dans [47]. Page : 46

Figure 8 : Algorithme du modèle pseudo-analytique. Page : 47

Figure 9 : Illustration du déplacement de l'oxyde lors d'une étape d'oxydation : a) oxyde initial, b) structure après l'étape élémentaire d'oxydation. Page : 47

Figure 10 : Illustration du déplacement analytique de l'oxyde. Page : 48

Figure 11 : Photographies SEM de deux structures LOCOS fabriqués à 920°C : a) l'épaisseur du nitrure est 190 nm , b) l'épaisseur du nitrure est 100 nm [50]. Page : 50

Figure 12 : Evolution des profils a) de contraintes normales b) de pression, le long de l'interface Si/SiO₂ durant la simulation numérique de la structure LOCOS. Page : 51

Figure 13 : Profil analytique du champ de contrainte normale à l'interface Si/SiO₂ Page : 52

- Figure 14 : Simulation par défaut de la structure LOCOS1 avec le modèle pseudo-analytique. Page : 53
- Figure 15 : Simulation par défaut de la structure LOCOS2 avec le modèle pseudo-analytique. Page : 54
- Figure 16 : Confrontation de l'approche semi-analytique avec le procédé étudié par Umimoto[52]. L'épaisseur du nitrure est 180 nm. (a) Simulation pseudo-analytique. (b) Résultats de simulations par les modèles numériques de Umimoto, avec et sans effet de contraintes et relevé expérimental. Page : 55
- Figure 17 : Confrontation de l'approche semi-analytique avec le procédé étudié par Umimoto[52]. L'épaisseur du nitrure est 120 nm. (a) Simulation pseudo-analytique. (b) Résultats de simulations par les modèles numériques de Umimoto, avec et sans effet de contraintes et relevé expérimental. Page : 55
- Figure 18 : Confrontation de l'approche semi-analytique avec le procédé étudié par Umimoto[52]. L'épaisseur du nitrure est 40 nm. (a) Simulation pseudo-analytique. (b) Résultats de simulations par les modèles numériques de Umimoto, avec et sans effet de contraintes et relevé expérimental. Page : 56
- Figure 19 : Structure des algorithmes de modélisation numérique de l'oxydation thermique du silicium. Page : 57
- Figure 20 : Extraction des contraintes tensile et compressive maximales. Comparaison entre les relations (14 et 16) et les valeurs extraites de la simulation numérique. Page : 61
- Figure 21 : Extraction de l'extension de la zone de compression sous le nitrure et de la longueur caractéristique de décroissance de la compression. Comparaison entre les relations (17 et 18) et les valeurs extraites de la simulation numérique. Page : 62

Chapitre 3 L'approche IMPACT-4

- Figure 1 : Schématisation de la déformation de l'oxyde lors de sa croissance : a) croissance uniaxiale, b) dilatation [7]. Page : 74
- Figure 2 : Algorithmes des modèles d'oxydation implantés dans IMPACT-4 : a) modèle complet, b) modèle incomplet. Page : 75
- Figure 3 : Mécanismes intervenant dans une oxydation 2D : a) diffusion des agents oxydants dans l'oxyde, b) croissance de l'oxyde et déformation de la structure. Page : 76

- Figure 4 : Définition du champ de contraintes. Page : 80
- Figure 5 : Définition de l'axe hydrostatique D et du plan octaédrique P dans un repère principal. Page : 82
- Figure 6 : Définition du champ de déplacements : u et v sont les déplacements dans les directions x et y, respectivement. Page : 83
- Figure 7 : Principe de sollicitation mécanique de la structure pour a) le modèle incomplet, b) le modèle complet. Page : 85
- Figure 8 : Comportements rhéologiques non-linéaires : a) différents types d'écoulements, b) variation de la viscosité en fonction des contraintes de cisaillement pour le modèle de Eyring. Page : 91
- Figure 9 : Comparaison des modèles analogiques de a) l'élastoplasticité et b) la viscoélasticité non-linéaire. Page : 92
- Figure 10 : Définition des états de contraintes de la silice en croissance sur a) un substrat cylindrique, b) un substrat concave. σ_r , σ_θ et P sont respectivement les composantes radiale et tangentielle de la contrainte et P est la pression hydrostatique de la silice. Page : 98
- Figure 11 : Etapes systématiques permettant le maillage d'un domaine dans IMPACT-4 : a) une grille de points est superposée aux noeuds définissant l'enveloppe du domaine, b) la triangulation est effectuée avec le critère de Delaunay, c) une procédure itérative de régularisation est appliquée aux coordonnées des noeuds intérieurs au domaine [39]. Page : 101
- Figure 12 : Régénération du maillage au cours d'une étape d'oxydation : cas du modèle complet. Page : 105
- Figure 13 : Régénération du maillage au cours d'une étape d'oxydation : cas du modèle incomplet. Page : 107
- Figure 14 : Comparaison entre la simulation IMPACT-4 et la photographie TEM du procédé d'isolation SWAMI, avant et après oxydation [44]. Page : 109
- Figure 15 : Simulation d'une oxydation à haute pression (10 atm.) sur un substrat de type tranchée. Page : 110
- Figure 16 : Structure LOCOS enterrée. Le profil de contraintes correspond à la pression hydrostatique dans l'oxyde (unités en MPa). Page : 111
- Figure 17 : Simulation d'une structure SILO : a) schématisation de la structure initiale, b) résultat de la simulation, présenté avec le profil de pression. Les zones foncées correspondent au maximum de pression ($\sigma = +500$ MPa) et les zones claires au maximum de tension ($\sigma = -500$ MPa). Page : 112

- Figure 18 : Simulation de la structure “tranchée” : a) Simulation sans effet des contraintes, b) résultats incluant les effets des contraintes. Le profil de dopage en bore est également indiqué. Page : 113
- Figure 19 : Comparaison des deux approches implantées dans IMPACT-4 pour la simulation de l’oxydation du silicium : a) résultat avec le modèle incomplet, b) simulation avec le modèle complet. Page : 114
- Figure 20 : Structure LOCOS [47]. La simulation a été réalisée avec un pas de maillage double de celui utilisé pour les résultats de la figure 19. Le profil de la pression hydrostatique interne est donné en MPa. Page : 115
- Figure 21 : Distribution bidimensionnelle de la pression hydrostatique interne pour la structure LOCOS décrite en [47]. Page : 116
- Figure 22 : Structure Poly-Buffer LOCOS [48]. L’épaisseur finale de l’oxyde de champ est égale à 0.7 mm. Le profil des contraintes normales dans la direction Y est donné en MPa. La simulation est effectuée avec le modèle complet (le temps CPU égal à 5245 secondes). Page : 117
- Figure 23 : Structure Poly-Buffer LOCOS. L’épaisseur finale de l’oxyde de champ est égale à 0.7 mm. Le profil des contraintes normales dans la direction Y est donné en MPa. La simulation est effectuée avec le modèle incomplet [48]. Page : 118

Chapitre 4 Analyse des contraintes

- Figure 1 : Formation de la grille et du “spacer” d’un transistor MOS de type LDD. Le profil de pression est donné en MPa et correspond aux déformations élastiques subies par les matériaux lors des cycles thermiques. Page : 125
- Figure 2 : Simulation du procédé LOCOS : a) forme d’oxyde, b) profil 1D de la pression en $x=1.5\text{mm}$. Page : 129
- Figure 3 : Simulation du procédé LOCOS : a) forme d’oxyde pour $V_D=0$, b) comparaison des profils 1D de la pression en $x=1.5\text{mm}$ avec le cas standard. Page : 130
- Figure 4 : Simulation du procédé LOCOS : a) forme d’oxyde pour $V_D=V_K=0$, b) comparaison des profils 1D de la pression en $x=1.5\text{mm}$ avec le cas standard. Page : 131
- Figure 5 : Simulation du procédé LOCOS : a) forme d’oxyde pour une valeur du coefficient parabolique divisée par 20 (1990 minutes), b) comparaison du profil 1D de la pression en $x=1.5\text{mm}$ avec le cas standard. Page : 133

- Figure 6 : Simulation du procédé LOCOS : a) forme d'oxyde pour une valeur de la viscosité du nitrure égale à 1017, b) comparaison du profil 1D de la pression en $x=1.5\text{mm}$ avec le cas standard. Page : 134
- Figure 7 : Simulation du procédé LOCOS : a) forme d'oxyde pour une valeur de la viscosité de l'oxyde égale à 1017, b) comparaison du profil 1D de la pression en $x=1.5\text{mm}$ avec le cas standard. Page : 135
- Figure 8 : Simulation du procédé LOCOS : a) forme d'oxyde pour $VPO=0$ et $h_0=1017$, c) forme d'oxyde pour $VPO=1000$ et $h_0=1017$, b) et d) comparaison des profils 1D de la pression en $x=1.5\text{mm}$ avec le cas standard. Page : 137
- Figure 9 : Maillage à l'issue de l'oxydation d'une structure concave. Page : 140
- Figure 10 : Influence du coefficient VD et de la viscosité du nitrure sur l'épaisseur centrale de l'oxyde de champ. Page : 140
- Figure 11 : Organigramme explicitant la procédure d'extraction des paramètres relatifs à l'oxyde pour le modèle viscoélastique non-linéaire. Page : 142
- Figure 12 : Résultats de simulation des structures analytiques de Kao : Iso-valeurs de contraintes (MPa) pour a) une structure convexe (contraintes normales en X), b) une structure concave (contraintes normales en Y). Page : 143
- Figure 13 : Variation des épaisseurs d'oxyde en fonction du rayon final de l'interface Si/SiO₂ pour une oxydation réalisée à : a) 800°C, b) 900°C. Les épaisseurs d'oxyde sont normalisées à leurs valeurs 1D. Page : 144
- Figure 14 : Variation des épaisseurs d'oxyde en fonction du rayon final de l'interface Si/SiO₂ pour une oxydation réalisée à : a) 1000°C, b) 1100°C. Les épaisseurs d'oxyde sont normalisées à leurs valeurs 1D. Page : 145
- Figure 15 : Variation de la déflexion du nitrure et de la longueur de la zone de transition en fonction de l'épaisseur du nitrure. Les paramètres B2 et H3 sont normalisés par TOX. Page : 146
- Figure 16 : Réduction de l'épaisseur de l'oxyde de champ en fonction de l'ouverture du masque d'oxydation. Le procédé est réalisé à 1000°C, l'épaisseur du piédestal vaut 20 nm et l'épaisseur du nitrure est égale à 100 nm. Le résultat de simulation pour une ouverture de 0.7 micron est présenté avec la distribution de la pression hydrostatique (Unités : MPa). Page : 148
- Figure 17 : Variation de la déflexion normalisée du nitrure, $H3/TOX$ avec la largeur du masque de nitrure : a) Confrontation aux résultats expérimentaux obtenus à 1000°C, épaisseur d'oxyde : 15 nm, épaisseur du nitrure : 140 nm [27], b) simulations correspondantes, $W'=1.8\text{ mm}$, 0.6 mm, 0.37 mm et 0.1 mm. Page : 149
- Figure 18 : Oxydation d'un substrat cylindrique : définition des variables. Page : 151

- Figure 19 : Variation temporelle de la contrainte tangentielle au sein d'un oxyde de silicium en croissance sur un substrat cylindrique pour une température de a) 800oC, b) 1000oC. Les comportements élastiques, visqueux linéaires et non-linéaires, viscoélastiques linéaires et non-linéaires sont représentés. $t_{linéaire}$ et $t_{non-linéaire}$ sont respectivement les temps de relaxation des modèles viscoélastiques linéaires et non-linéaires. Page : 155
- Figure 20 : Contrainte radiale au sein d'un oxyde de silicium, résultat de l'oxydation d'un substrat cylindrique de rayon 1.2 mm à : a) 800oC, b) 1000oC. Les résultats numériques proviennent d'IMPACT-4, la solution analytique est de Rafferty [33]. Page : 156
- Figure 21 : Formes d'oxyde résultantes de la simulation d'une étape d'oxydation à : a) 1000oC, 1 atm., 100 mn. et b) 800oC, 2.5 atm., 500 mn., en ambiance humide. Les modèles non-linéaires visqueux et viscoélastiques sont comparés pour chaque température. Page : 158
- Figure 22 : Distribution du temps de relaxation des contraintes pour la structure LOCOS fabriquée à 800oC avec le modèle viscoélastique non-linéaire. Le temps de relaxation intrinsèque $t_r=h_0/G$ est égal à 532 minutes. Page : 159

Chapitre 5 Applications

- Figure 1 : Définition des paramètres géométriques de la structure. Page : 165
- Figure 2 : Comparaison des structures initiales et après oxydation du LOCOS enterré pour cinq valeurs différentes de la sous-gravure : a) 67, b) 212, c) 357, d) 502, e) 647 nm. Page : 166
- Figure 3 : Superposition des profils d'oxyde du LOCOS enterré pour des sous gravures égales à : a) 647, b) 357 et c) 67 nm. Page : 167
- Figure 4 : Comparaison des structures initiales et après oxydation du LOCOS enterré pour trois valeurs différentes de la profondeur de gravure : a) 435 , b) 580 et c) 725 nm. Page : 168
- Figure 5 : Superposition des profils d'oxyde du LOCOS enterré pour les profondeurs de gravure égales à : a) 435 , b) 580 et c) 725 nm. Page : 168
- Figure 6 : Comparaison des structures initiales et après oxydation du LOCOS enterré pour trois formes différentes de gravure sous le masque. Page : 169
- Figure 7 : Superposition des profils d'oxyde du LOCOS enterré pour les trois formes de gravure définies à la figure 6. Page : 170

- Figure 8 : Photographie SEM de la gravure du silicium pour la structure d'isolation du procédé QUBIC1 [8]. Page : 171
- Figure 9 : Structure LOCOS enterrée : a) résultat de la simulation, le profil de la structure initiale est donné en sur-impression. Le profil de contraintes correspond aux contraintes de cisaillement dans le plan cristallin (111) du silicium (unités en MPa), b) photographie SEM correspondante [8]. Page : 171
- Figure 10 : Représentation schématique de la gravure du silicium. Page : 172
- Figure 11 : Définition des paramètres géométriques du LOCOS enterré. Page : 173
- Figure 12 : Variations des paramètres géométriques de l'oxyde enterré en fonction de la longueur de la sous-gravure. La profondeur de la gravure, la pente et le rayon de courbure sont respectivement égaux à 580 nm, 90° et 290 nm. Page : 174
- Figure 13 : Variations des paramètres géométriques de l'oxyde enterré en fonction de la profondeur de la gravure. La sous-gravure, la pente et le rayon de courbure sont respectivement égaux à 212 nm, 90° et 290 nm. Page : 175
- Figure 14 : Gravure initiale du substrat de silicium (pointillé) et résultat de la simulation après oxydation à 1000°C, 1 atm., 405 minutes, en ambiance humide. Les sous-gravure, profondeur de gravure, et rayon de courbure du coin concave sont respectivement égaux à : 212nm, 580nm et 290 nm. La pente en bord de gravure vaut 90°. La distribution de la pression hydrostatique est donnée en MPa. Page : 176
- Figure 15 : Gravure initiale du substrat de silicium (pointillé) et résultat de la simulation après oxydation à 1000°C, 1 atm., 405 minutes, en ambiance humide. Les sous-gravure, profondeur de gravure, et rayon de courbure du coin concave sont respectivement égaux à : 212nm, 580nm et 290 nm. La pente en bord de gravure vaut 30°. La distribution de la pression hydrostatique est donnée en MPa. Page : 177
- Figure 16 : Variation de l'épaisseur d'oxyde au centre de la structure et du maximum de pression hydrostatique en fonction de la pente de la gravure. Page : 177
- Figure 17 : Gravure initiale du substrat de silicium (pointillé) et résultat de la simulation après oxydation à 1000°C, 1 atm., 60 minutes, en ambiance humide. Les sous-gravures, profondeurs de gravure, et pentes de la gravure sont respectivement égales à : 212nm, 580nm et 90°. Le rayon de courbure du coin concave vaut a) 520 nm, b) 20 nm. La distribution de la pression hydrostatique est donnée en MPa. Page : 178
- Figure 18 : Avantages et inconvénients des différentes configurations possibles de la gravure du silicium. Page : 179

- Figure 19 : Comparaison des distributions spatiales de la pression hydrostatique dans l'oxyde après 405 minutes d'oxydation en ambiance humide à 1000°C : a) ouverture du masque égale à 3 mm, b) ouverture égale à 0.5 mm (Unités en MPa). Page : 181
- Figure 20 : Variations de l'épaisseur d'oxyde normalisé en fonction de l'ouverture du masque de nitrure (W). TYPE 1 : $X=0.245$ mm, $L_{mas}=4$ mm, $Y_{max}=0.58$ mm (figure 22). TYPE 2 : $X=0.18$ mm, $L_{mas}=4$ mm, $Y=0.58$ mm. Page : 182
- Figure 21 : Variations de l'épaisseur d'oxyde normalisé en fonction de l'ouverture du masque de nitrure (W). TYPE 1 : $X=0.245$ mm, $L_{mas}=4$ mm, $Y_{max}=0.58$ mm (voir figure 22). Page : 183
- Figure 22 : Comparaison de la forme des gravures initiales (type1) pour deux ouvertures du masques de nitrure : A) $W=12$ mm, B) $W=1$ mm. La profondeur de gravure diminue avec des ouvertures étroites. Page : 184
- Figure 23 : Caractéristiques géométriques de l'isolation enterrée en fonction de l'ouverture du masque. $X=0.245$ mm, $L_{mas}=4$ mm et le temps d'oxydation est égal à 405 minutes. Page : 185
- Figure 24 : Variations de l'épaisseur centrale du piédestal [T1] et de la longueur effective de la zone active en fonction de la longueur du masque [L_{mas}]. Temps d'oxydation : 405 minutes, $X=0.245$ mm, $Y=0.58$ mm, $W=8$. mm. Page : 186
- Figure 25 : Formes du bec d'oiseau pour différentes longueurs du masque : 1) $L_{mas}=1$ mm, 2) $L_{mas}=1.8$ mm, 3) $L_{mas}=2$ mm, 4) $L_{mas}=3$ mm, 5) $L_{mas}=4$ mm. Temps d'oxydation : 405 minutes, $X=0.245$ mm, $Y=0.58$ mm, $W=4$. mm. Page : 186
- Figure 26 : Evolution temporelle des isolations de types LOCOS et LOCOS enterré. Les conditions d'oxydation sont celles du procédé QUBIC1. Page : 187
- Figure 27 : Comparaison des structures enterrée et non-enterrée après 405 minutes d'oxydation en ambiance humide à 1000°C. Page : 188
- Figure 28 : Distribution 2D des contraintes de cisaillement calculées dans le plan (111) du silicium pour le LOCOS enterré. Temps d'oxydation : 405 minutes, $X=0.245$ mm, $Y=0.58$ mm, $W=6$. mm, $L_{mas}=4$ mm. Page : 188
- Figure 29 : Distribution 2D des contraintes de cisaillement calculées dans le plan (111) du silicium pour le LOCOS. Temps d'oxydation : 405 minutes, $W=6$ mm, $L_{mas}=4$ mm.. Page : 189
- Figure 30 : a) Structure initiale du dispositif SILO, b) forme d'oxyde finale. L'amincissement de la couche d'oxyde à l'extrémité du masque met en évidence son rôle d'amortisseur des contraintes. Page : 190
- Figure 31 : Modélisation du scellement du nitrure I avec le substrat : a) adhésion parfaite, la vitesse d'oxydation est parallèle à l'interface, b) l'imperfection du scellement est modélisée par l'introduction d'une fine couche d'oxynitrure. Page : 191

- Figure 32 : Simulations de structures SILO pour deux cas extrêmes de la qualité du scellement : a) $\text{anit} = 0$, b) $\text{anit} = 1$. La distribution de la pression est donnée en MPa. Page : 192
- Figure 33 : Simulation d'une structure SILO : résultat de la simulation, présenté avec le profil de pression. Les zones foncées correspondent au maximum de pression (^a +500 MPa) et les zones claires au maximum de tension (^a -500 MPa). Page : 193
- Figure 34 : Variation de la longueur de bec d'oiseau avec a) l'épaisseur de la couche de nitrure II, b) l'épaisseur de l'oxyde de champ. L'épaisseur de la couche d'oxyde du masque est de 40 nm. Les résultats expérimentaux correspondent à deux épaisseurs du nitrure I: 8 et 15 nm [12]. Page : 194
- Figure 35 : Variation de l'épaisseur normalisée de l'oxyde de champ d'une structure SILO, fabriquée à 950°C (120.5 minutes) en fonction de l'ouverture du masque. Les caractéristiques du masque sont 10 nm de nitrure I/ 40 nm d'oxyde/ 50 nm de nitrure II. Le résultat expérimental de Déléonibus [15] est également rapporté. Page : 194
- Figure 36 : Sensibilité du procédé SILO à la génération de dislocations dans le substrat en fonction de la configuration du masque d'oxydation. Les figures grisées correspondent à des dispositifs présentant des dislocations d'après les résultats expérimentaux de Déléonibus [12]. L'isovaleur égale à 50 MPa définit la zone tensile de la composante normale suivant Y du tenseur des contraintes. Elle permet d'évaluer si des dislocations sont générées ou non. Page : 196
- Figure 37 : Structures PBL fabriquées à 1000°C, possédant une épaisseur d'oxyde de champ égale à 0.6 mm. Le masque est constitué de 200nm de Si₃N₄, 50 nm de polysilicium et a) 10 nm, b) 20 nm d'oxyde. La pression hydrostatique est donnée en MPa. Page : 198
- Figure 38 : Structures PBL fabriquées à 1000°C, possédant une épaisseur d'oxyde de champ égale à 0.6 mm. Le masque est constitué de 200nm de Si₃N₄, 50 nm de polysilicium et a) 30 nm, b) 40 nm d'oxyde. La pression hydrostatique est donnée en MPa. Page : 199
- Figure 39 : Variation des paramètres géométriques sélectionnés du bec d'oiseau en fonction de l'épaisseur du piédestal. Page : 200
- Figure 40 : Variation de l'épaisseur normalisée de l'oxyde de champ en fonction de l'ouverture du masque. Page : 201
- Figure 41 : Structures PBL fabriquées à 1000°C, possédant une épaisseur d'oxyde de champ égale à 0.392 mm. Le masque est constitué de 200nm de Si₃N₄, 50 nm de polysilicium et 10 nm d'oxyde. L'ouverture du masque est de 0.5 mm. La pression hydrostatique est donnée en MPa. Page : 201

- Figure 42 : Configuration initiale du masque d'oxydation et forme d'oxyde simulée pour : a) un LOCOS , b) un PBL, fabriqués en ambiance humide à 1000°C, pendant 85 minutes. La modélisation suppose, pour le PBL, l'existence d'une couche d'oxyde entre le nitrure et le polysilicium d'une épaisseur de 4nm. Page : 202
- Figure 43 : Configuration initiale du masque d'oxydation et forme d'oxyde simulée pour : a) un LOCOS , b) un PBL, avec espaceurs de nitrure, fabriqués en ambiance humide à 1000°C, pendant 85 minutes. Page : 203
- Figure 44 : Configuration initiale du masque d'oxydation et forme d'oxyde simulée pour : a) un LOCOS "encadré", b) un PBL "encadré", fabriqués en ambiance humide à 1000°C, pendant 85 minutes. Le cas b) est donné avec la distribution de la pression hydrostatique en MPa. Page : 203
- Figure 45 : Configuration initiale du masque d'oxydation et forme d'oxyde simulée pour : a) un LOCOS encapsulé, b) un PBL encapsulé, fabriqués en ambiance humide à 1000°C, pendant 85 minutes. Le cas a) est donné avec la distribution des contraintes normales dans la direction Y en MPa. Page : 204
- Figure 46 : Variation de la hauteur du bec d'oiseau, H3, en fonction de la longueur du masque d'oxyde pour des techniques "Framed" et "Encapsulated" de LOCOS et PBL. Page : 205
- Figure 47 : Photographies SEM des deux types de structures d'isolation servant de base à l'étude des transistors parasites : (a) LOCOS semi-enterré, (b) LOCOS enterré [23]. Page : 207
- Figure 48 : Profil de dopage simulé pour le procédé LOCOS semi-enterré à l'issue de l'implantation d'arsenic : a) profil de dopage en coupe dans la zone de champ, b) tracé d'iso-concentrations d'arsenic et de bore. Page : 208
- Figure 49 : Résultats de simulation d'un transistor MOS parasite sur LOCOS semi-enterré. La longueur du dispositif simulé est de 4 mm, la polarisation est donnée par $V_S=V_B=0V$, $V_D=50\text{ mV}$ et $V_G=25V$. (a) Tracé de courbes iso-potentielles. (b) Tracé d'iso-concentrations d'électrons indiquant clairement la formation d'un canal. Page : 210
- Figure 50 : Caractéristiques $I_D=f(V_G)$ du transistor parasite correspondant à la structure LOCOS semi-enterrée. $V_S=V_B=0V$ et $V_D=50\text{ mV}$. Page : 211
- Figure 51 : Résultat de simulation de la structure LOCOS enterrée indiquant les iso-concentrations de dopants. Ce résultat est obtenu à l'issue du recuit de source et de drain. Page : 211
- Figure 52 : Caractéristiques $I_D=f(V_G)$ du transistor parasite correspondant à la structure LOCOS enterrée pour $V_S=V_B=0V$ et $V_D=50\text{ mV}$. Page : 212

Figure 53 : Superposition des résultats de simulation de la structure LOCOS enterrée pour les trois gravures différentes. (a) Profils gravés avant l'oxydation de champ. (b) Formes finales d'oxyde et tracés d'iso-concentrations de bore et d'arsenic. Page : 213

Figure 54 : Comparaison des caractéristiques $I_D=f(V_G)$ simulées pour les trois structures LOCOS enterrées correspondant aux différentes gravures. La longueur des transistors est de 16 μm , $V_S=V_B=0\text{V}$ et $V_D=50\text{ mV}$. Page : 214

Liste des tables

Chapitre 1 Introduction

Table I Rôles des constituants d'un dispositif BICMOS en termes de performances et d'isolation. Page : 15

Chapitre 3 L'approche IMPACT-4

Table I Modèles analogiques pour les principaux comportements rhéologiques. χ , G et η sont respectivement les modules de compressibilité, de rigidité et la viscosité du matériau. Page : 89

Table II Constantes élastiques des matériaux. Page : 94

Chapitre 4 Analyse des contraintes

| | |
|----------|--|
| Table I | Définition des paramètres du modèle numérique d'oxydation. Page : 138 |
| Table II | Conditions d'oxydation des expériences de Kao en ambiance humide pour un substrat plan. Page : 139 |
| Table II | Ensemble des paramètres calibrés pour le modèle viscoélastique non-linéaire. Page : 147 |