

juin 2000 6519

N° d'ordre: 2287

THÈSE

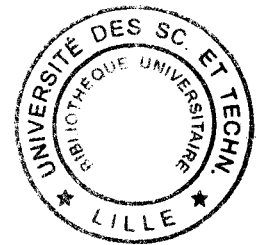
présentée à
L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE LILLE
(U.F.R. d'Electronique)
pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE LILLE I
(libellé Européen)

Spécialité: ELECTRONIQUE

par

Agnès TIXIER



Ingénieur de l'Institut des Sciences de la Matière et du Rayonnement

**Etude et Caractérisation de Structures
d'Isolément de Type LOCOS pour une
Technologie CMOS 0.35 μm**

**Studio e Caratterizzazione di Strutture
d'Isolamento di Tipo LOCOS per una
Tecnologia CMOS 0.35 μm**

Soutenue le 29 Juin 1998, devant la commission d'examen:

Président: M. G. Salmer
Rapporteurs: M. A. Armigliato (Université de Bologne, Italie)
M. J.P. Colinge (Université Catholique de Louvain, Belgique)
M. D. Barbier (INSA de Lyon, France)
Directeur de Recherche: M. D. Collard
Co-responsable de thèse: M. V. Senez
Examineurs: M. A. Marmiroli
M. H. Jaouen
M. R. De Keersmaecker

à ma famille

a tutte le persone molto care
che ho conosciuto in Italia

à mes amis d'ici et d'ailleurs

Cette thèse a été préparée en collaboration avec:

STMicroelectronics, secteur Recherche et Développement,
Agrate (MI), Italie

et le laboratoire de

l'Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord
(IEMN-UMR CNRS 9929)
Lille, France

Remerciements

Ce travail s'est déroulé au sein de STMicroelectronics, dans le département Recherche et Développement d'Agrate (MI), Italie. Il s'est effectué en collaboration avec le laboratoire IEMN-ISEN du CNRS de Lille, France et le laboratoire LAMEL du CNR de Bologne, Italie.

J'exprime ma reconnaissance à Monsieur le Professeur G. Salmer qui a permis à cette thèse de se réaliser et qui a accepté la présidence de ce jury.

Je remercie Monsieur le Professeur D. Collard d'avoir accepté d'être mon Directeur de thèse.

J'exprime toute ma gratitude à Monsieur V. Senez pour m'avoir guidée dans la rédaction de cette thèse et pour sa participation dans ce jury comme co-responsable de thèse. Ses conseils m'ont été précieux.

Les trois années de cette thèse passée au sein de STMicroelectronics ont été très enrichissantes. J'exprime mes plus sincères remerciements à Monsieur A. Marmioli pour m'avoir accueillie au sein de son équipe TCAD, pour m'avoir encadrée tout au long de ce travail, ainsi que pour avoir été membre de ce jury.

Le travail réalisé en collaboration avec le laboratoire LAMEL a été source de beaucoup d'intérêts scientifiques et de plaisir. Je remercie chaleureusement Monsieur A. Armigliato pour son dynamisme et pour avoir été rapporteur de ma thèse et membre de ce jury.

Monsieur J.P. Colinge et Monsieur D. Barbier ont accepté d'être eux aussi rapporteurs de ma thèse. Je les remercie vivement de leur intérêt pour ce travail. Je remercie Monsieur J.P. Colinge d'avoir été le "troisième" homme, et Monsieur D. Barbier d'être venus pour participer au jury de cette thèse. Je remercie Monsieur H. Jaouen et Monsieur R. De Keersmaecker pour leur participation en tant que membres du jury.

Cette thèse n'aurait pu se faire dans ces conditions, chez STMicroelectronics, sans la présence de Monsieur Crisenza, Monsieur C. Lombardi et

Madame C. Robin que je remercie sincèrement.

La partie technologique de cette thèse a été réalisée grâce à Monsieur P. Colpani. Je le remercie pour les nombreuses discussions que nous avons eues à ce sujet, et pour sa curiosité de physicien.

Je tiens à ringraziare tantissimo Monsieur G.P. Carnevale (alias GP) pour l'aide qu'il m'a apportée tout au long de ces trois années et pour avoir facilité mon intégration en Italie et au sein de STMicroelectronics. Et, il est vrai que Bergame est la plus belle ville de...

La collaboration avec le LAMEL a été enrichie par la présence de Messieurs R. Balboni, S. Frabboni et S. Balboni (merci pour sa tesi). Je les remercie pour leur aide et leurs discussions scientifiques.

Je remercie Madame E. Lampin pour ses explications sur la dynamique moléculaire et son aide bien précieuse à propos de Latex...

Comment oublier tous ceux que j'ai connus en Italie chez STMicroelectronics et qui sont pour beaucoup dans le bon déroulement et la réussite de cette thèse: Augusto, Gio' (e la colomba), Alberto (Pregnolo), Lara (et Dimitri, bien sûr), Cristiano S. (une grande embrassade...), Betti, Enrico, Federica, the mdmlab's girls, Nico, e tous les autres! Merci à vous tous pour les très bons moments passés! Je remercie spécialement les Napolitains et Siciliens de STMicroelectronics qui ont apporté avec eux le soleil et la chaleur du sud: Valeria, Patrizia, Marcello...

Je transmets toutes mes sympathies (et même bien plus...) à la bande des CSNE d'Agrate. Je souhaite que la bonne ambiance régnant au milieu d'eux se perpétue.

Le retour en France et l'arrivée à Lille auraient été moins agréables si Evelyne, Thomas, Dorothée, Jérôme, Guillaume, Joël, Jean-Luc, Manu, Jean-Michel (merci pour les nombreuses fois où tu as débloqué le serveur qui avait été malencontreusement mis HS), Florence, Valérie n'avaient pas été présents.

Je remercie très chaleureusement toute ma famille: Papa, Maman, Véronique et Guilhem pour la confiance qu'ils m'ont montrée, au cours de ces trois années.

Enfin, je n'oublie certainement pas ma "soeur" italienne Isabella, et sa famille, Fiorella, Mimo et Serena, pour leur accueil à bras ouverts à Milan. Ils sont eux aussi pour beaucoup dans la réussite de cette thèse...

Table des matières

I	Introduction	11
I.1	Présentation de STMicroelectronics	11
I.1.1	Position dans le monde	11
I.1.2	Historique de l'entreprise	12
I.1.3	Produits fabriqués	13
I.2	Présentation du site d'Agrate	13
I.3	Fabrication d'un circuit intégré	16
I.3.1	Étapes principales de la fabrication	16
I.3.2	L'étape d'isolement	19
I.4	Les outils de simulation	26
I.4.1	Historique et description	26
I.4.2	La simulation de procédés	26
I.4.3	Intéraction entre simulateurs et réalité	27
I.5	Organisation du manuscrit	29
II	Calibration du programme de simulation IMPACT-4	35
II.1	Description du modèle d'oxydation du silicium	36
II.1.1	Modèle d'oxydation mono et bi-dimensionnel	37
II.1.2	Modèles rhéologiques - Calcul des contraintes	40
II.1.3	L'approche d'IMPACT-4	43
II.2	Première calibration	44
II.2.1	Méthode de calibration: RSM ou EMB	45
II.2.2	Contexte de la première calibration	47
II.2.3	Première partie de la calibration: les paramètres relatifs au nitrure.	53
II.2.4	Deuxième partie de la calibration: paramètres relatifs à l'oxyde	60
II.3	Seconde calibration	68
II.3.1	Description des structures de référence et présentation des cinq plans d'expérience	68
II.3.2	Méthode utilisée pour chaque calibration	70
II.3.3	Description des plans d'expérience	73

II.3.4	Application des résultats de la calibration	79
II.4	Conclusions	85
III	Etude de la structure NCLAD	91
III.1	Description des structures NCLAD	93
III.1.1	Dépôt du nitrure de silicium	93
III.1.2	Fabrication de la structure NCLAD	93
III.1.3	Mécanisme et cinétique d'oxydation du nitrure	96
III.2	Modélisation de l'oxydation du nitrure de silicium	99
III.2.1	Définition des variables utilisées	100
III.2.2	Modèle empirique de Kamins	100
III.2.3	Modèle de Enomoto	101
III.2.4	Modèle de Deal et Grove	106
III.3	Implantation du modèle de Deal et Grove, pour l'oxydation du Si_3N_4	110
III.3.1	Technique de calcul numérique dans IMPACT4	110
III.3.2	Implantation du modèle d'oxydation du Si_3N_4 dans IMPACT-4	114
III.3.3	Limites de l'implantation	115
III.4	Application aux structures NCLAD	117
III.4.1	Structures LOCOS (NCLAD) et LOCOS (NCLAD) enterré de pitch $1.45 \mu\text{m}$	117
III.4.2	Optimisation de la largeur du "bouchon"	120
III.4.3	Influence du "bouchon" sur des structures LOCOS NCLAD de pitches $1.70/1.45/1.20 \mu\text{m}$	121
III.5	Conclusions	124
IV	Mesure des Contraintes du Substrat de Si par CBED	129
IV.1	Origines des contraintes mécaniques	130
IV.1.1	Les contraintes d'origine thermique	130
IV.1.2	Les contraintes intrinsèques	132
IV.1.3	Les contraintes issues de la croissance d'un matériau	133
IV.1.4	Application à IMPACT-4	134
IV.2	Etude indirecte/directe des contraintes	135
IV.2.1	Etude indirecte des contraintes	136
IV.2.2	Mesures directes des contraintes	140
IV.3	Mesures par diffraction électronique par faisceau convergent (CBED)	147
IV.3.1	Préparation de l'échantillon	148
IV.3.2	Appareillage et principe de la mesure	148
IV.3.3	Les figures de diffraction	150
IV.3.4	Mesure des déformations; calcul des contraintes	157

IV.4 Mesure des contraintes par CBED	162
IV.4.1 Etude des contraintes générées par une bande de nitrure	163
IV.4.2 Etude des contraintes générées dans une structure oxydée	171
IV.5 Conclusions	174
V Conclusions et Perspectives	183

Chapitre I

Introduction

Depuis 1958, le début de l'ère des circuits intégrés, on assiste à une explosion du secteur de la microélectronique. Les dispositifs électroniques se trouvent dans tous les domaines: informatique (32% du marché), électronique de consommation (21%), télécommunication (16.5%), électronique industrielle (14%), défense et espace (11%), transport (4%). La vente de ces produits a été multipliée par trente depuis quarante ans. Cette croissance phénoménale du marché est le résultat d'importants efforts de recherche en technologies de pointe et a entraîné le développement fantastique des industries de microélectronique. L'intégration des composants est leur défi permanent afin de rester compétitives. En Europe, STMicroelectronics, industrie franco-italienne, fait partie des dix premières industries mondiales. C'est au sein de celle-ci que cette thèse a été préparée. Elle a été effectuée à Agrate, près de Milan, en Italie, dans le groupe TCAD (Technology Computed Aided Design), animé par Andrea Marmiroli, dépendant du Département Non-Volatile Memory Process and Device Technology Modeling, dirigé par Claudio Lombardi.

I.1 Présentation de STMicroelectronics

I.1.1 Position dans le monde

STMicroelectronics est une entreprise de semiconducteurs indépendante qui conçoit, développe, produit et vend un large éventail de circuits intégrés semiconducteurs et de dispositifs discrets qui sont utilisés dans une grande variété d'applications, telles que les systèmes de télécommunication, les ordinateurs, les produits de consommation courante, et l'industrie automobile (figure I.1).

Elle est actuellement le plus important fournisseur au monde de circuits

intégrés analogiques, de circuits fournissant à la fois des signaux analogiques et numériques (mixte signals), d'économiseurs de puissance (smartpower), de mémoires EPROM, EEPROM et de décodeurs MPEG. En tout plus de 3000 types de produits sont proposés.

SGS-THOMSON : DIVERSIFIED CUSTOMER BASE

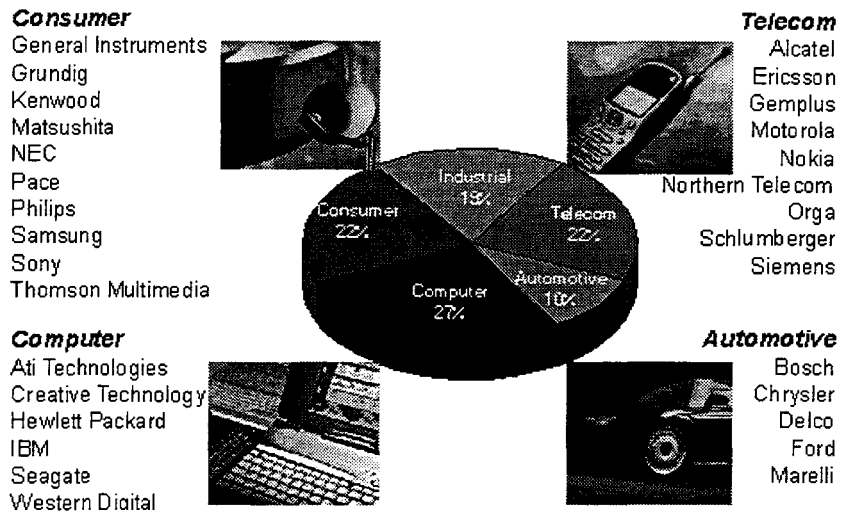


Figure I.1 – Présentation des différents débouchés pour les produits fabriqués par STMicroelectronics et ses différents clients.

I.1.2 Historique de l'entreprise

Le groupe STMicroelectronics est né en Juin 1987 de la fusion de THOMSON Semiconducteurs (France) et de SGS Microelettronica (Italie). Depuis sa formation, la compagnie a beaucoup élargi ses domaines de production et de technologie et a renforcé ses points de production et de distribution en Europe, Amérique du Nord et Asie.

L'entreprise compte 26000 employés, 9 départements de Recherche et de Développement, 31 centres de conception et d'application, 17 sites de fabrication principaux, et 60 bureaux de ventes dans 24 pays. Elle multiplie actuellement ses sites de fabrication sur plaques 8 pouces.

Environ 13% des revenus ont été investis dans le secteur R&D en 1996.

I.1.3 Produits fabriqués

Les dispositifs semi-conducteurs produits par STMicroelectronics couvrent les catégories suivantes:

- Circuits intégrés dédiés: ils sont destinés à une application bien spécifique. Par exemple: les puces des modems, les circuits de contrôle des moteurs de voiture, les amplificateurs audio, les puces MPEG, les lecteurs de disques video digitaux (DVD), les PC multimedia. Ces systèmes nécessitent des technologies avancées pour les composants bipolaires, CMOS, BiCMOS...
- Microprocesseurs et autres dispositifs programmables: c'est une gamme de produits allant de la plus simple puce de microcontrôleur 8bits aux microprocesseurs CISC et RISC 32 bits, en passant par les accélérateurs multimédias. STMicroelectronics conçoit actuellement des processeurs avancés, fondés sur l'architecture MPACT, développée pour la recherche chromatique. Ils sont utilisés pour les graphiques 2D et 3D, la vidéo...
- Produits dits "semicustom": ce sont des circuits intégrés dessinés à partir de bibliothèques de cellules et à l'aide de logiciels de CAD (Computed-Aided Design). Ils sont intégrés aux téléphones GSM, aux cartes de son PC...
- Mémoires: c'est le principal secteur d'activité de STMicroelectronics qui est un leader dans la fabrication des mémoires non volatiles de type EPROM, EEPROM et mémoires Flash. L'application la plus importante de la technologie EEPROM est les cartes à puces (smartcards).
- Circuits intégrés standards: un grand nombre de fonctions logiques sont fabriquées par STMicroelectronics (NAND, inverseurs...) ainsi que des comparateurs, des régulateurs de tension...
- Composants discrets: ce sont des dispositifs tels que les transistors bipolaires ou les MOS de puissance... Ils sont utilisés pour les amplificateurs de puissance.

I.2 Présentation du site d'Agrate

Le site d'Agrate existe depuis 1958. Il se situe à 15km à l'est de Milan, dans le nord de l'Italie. Il compte environ 3000 employés. Il s'agit d'un site de recherche et de développement ainsi que de production.

Sa ligne de fabrication utilise des plaques 6 pouces, mais une ligne 8 pouces est en train d'être construite, et entrera en activité en 1998. Le site développe et produit des composants dédiés aux télécommunications, à l'automobile, aux ordinateurs et aux télévisions, ainsi que des Mémoires (EPROM 16-Mbit, EEPROMs, FLASH). Les technologies utilisées en production sont caractérisées par des motifs minimaux de $0.4 \mu m$, $0.5 \mu m$ et $1.2 \mu m$, alors que le secteur de la Recherche et du Développement étudie déjà des structures avec des tailles de $0.18 \mu m$.

Le site d'Agrate est un des maillons de l'industrie mondiale des semi-conducteurs qui a fait des progrès extraordinaires en matières d'intégration des circuits. Depuis la création des premiers circuits intégrés à la fin des années 1950, la densité des dispositifs a très fortement augmenté, comme il est indiqué sur la figure I.2 [1, 2, 3].

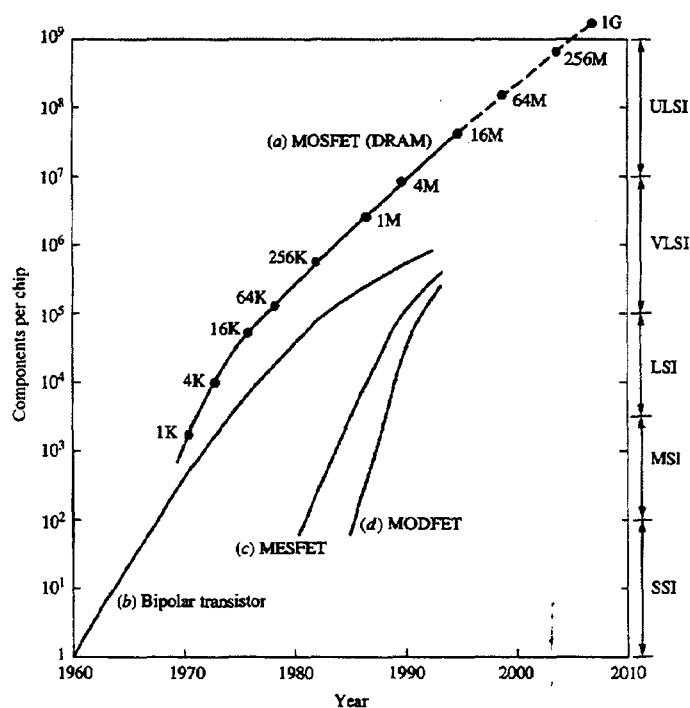


Figure I.2 – a) Croissance exponentielle du nombre de composants par circuit intégré CMOS [1, 2]. b), c) et d) Composants par puce électronique en fonction de l'année, respectivement pour les circuits bipolaires, MESFET et MODFET [3].

Depuis 1990, la densité a atteint 32 millions de dispositifs par puce (16

Mbit DRAMs), et l'on s'accorde à dire que l'ère des VLSI (Very Large Scale Integrated, ou, en français: circuits à très haute intégration) a laissé la place à celle des ULSI (Ultra Large Scale Integrated, ou, en français: circuits à ultra haute intégration). C'est en grande partie grâce à la réduction de la taille des dispositifs que l'on a pu connaître cette évolution passant de $25 \mu\text{m}$ en 1960 à $0.35 \mu\text{m}$ en 1998. La figure I.3 montre la réduction des dimensions au cours des années [4].

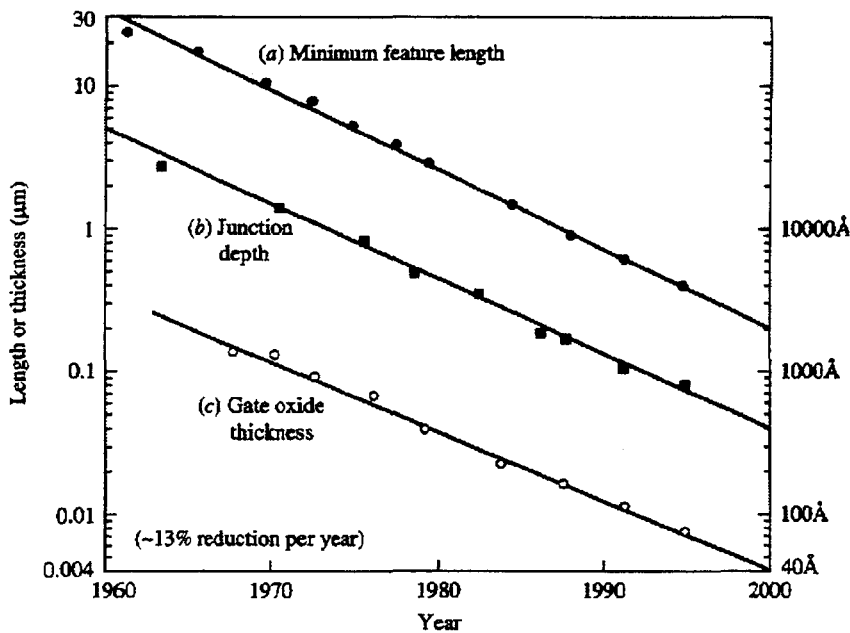


Figure I.3 – Décroissance exponentielle de a) la longueur minimale du dispositif, b) la profondeur de la jonction et c) l'épaisseur de l'oxyde de grille d'un MOSFET [4].

La réduction des dimensions des dispositifs est le succès des énormes efforts de recherche effectués depuis quarante ans afin d'optimiser chaque étape de la fabrication des circuits, en développant des machines et des procédés de plus en plus performants et précis. La partie suivante décrit tout d'abord brièvement les étapes principales de la fabrication et les améliorations à apporter aux procédés. Puis l'étape d'isolement, qui nous a intéressé tout au long de cette thèse, est expliquée en détail. On y présente notamment les paramètres sur lesquels agir pour optimiser cette étape.

I.3 Fabrication d'un circuit intégré

I.3.1 Etapes principales de la fabrication

La fabrication d'un circuit intégré, telle une mémoire Flash, nécessite la succession d'une soixantaine d'étapes, se divisant en une suite de modules: lavages, dépôts, gravures, implantations et traitements thermiques (recuits ou oxydations), au nombre de 270 environ. Chaque module de gravure et d'implantation demande l'utilisation d'un masque. Celui-ci permet, à l'aide d'un procédé de lithographie, de sélectionner une zone du substrat, plutôt qu'une autre, et sur laquelle le module sera réalisé. Actuellement, une vingtaine de masques sont utilisés, mais ceux-ci étant très onéreux, on tend à en réduire le nombre. Un exemple d'un circuit intégré de type mémoire FLASH est schématisé en coupe sur la figure I.4.

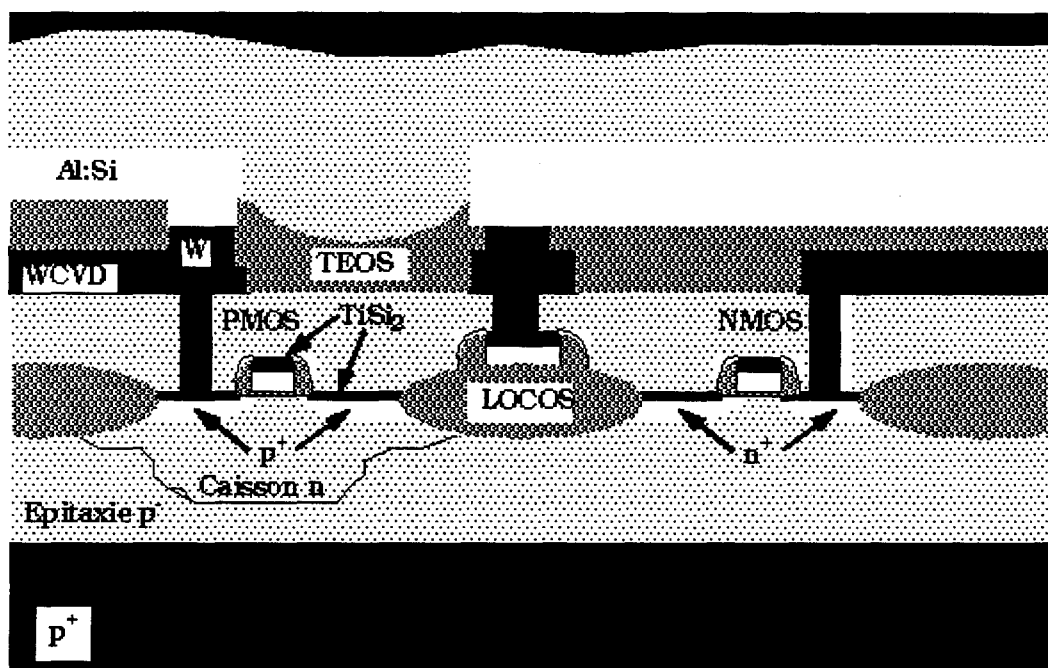


Figure I.4 – Schéma d'une coupe d'une zone d'un circuit CMOS où toutes les étapes nécessaires à la fabrication ont été réalisées.

Les différents modules utilisés au cours du procédé de fabrication sont décrits ci-dessous. Ils sont améliorés au cours du temps afin de favoriser la réduction des dimensions et l'augmentation de l'intégration. Coupler cet objectif avec un maintien voir une amélioration de la qualité est très délicat à atteindre, car il nécessite l'utilisation de technologies de plus en plus précises et un contrôle de plus en plus fin de la contamination, des dimensions, des contraintes... Les nouvelles technologies développées sont souvent coûteuses

et demandent un temps d'exécution plus important mais elles sont aussi les garantes d'une qualité essentielle pour les circuits ULSI.

- **lavage:** ce module est essentiel dans la technologie ULSI, car il est un moyen de se débarrasser des particules contaminantes (particules métalliques, résidus organiques...). Le lavage s'effectue en ambiance humide en suivant un procédé RCA modifié. Les procédés de lavages développés actuellement ne doivent plus seulement servir à enlever les particules contaminantes mais aussi à aplanir la surface, afin de faciliter l'exécution des étapes successives.
- **dépôt:** cette étape permet le dépôt de films sur lesquels les motifs dessinés par lithographie seront gravés. La méthode la plus utilisée est le CVD (Chemical Vapor Deposition, ou, en français: dépôt en phase vapeur) [5], avec ses variantes à basse pression (LPCVD) [6] et en plasma (PECVD) [7], pour le dépôt de SiO_2 et Si_3N_4 . Les films obtenus par ces méthodes doivent favoriser: la fabrication de petites géométries, la basse température de procédé, la réduction de la contamination, la planarisation et l'uniformité, le dépôt sélectif, et les propriétés du film. C'est justement dans l'obtention de la spécificité recherchée du film que se situe l'évolution de cette étape.
- **lithographie:** cette technique définit, en les sélectionnant, certaines zones de la plaque, qui subiront par la suite des traitements spéciaux. Une méthode d'impression d'un motif, dessiné sur un masque, est utilisée (exposition puis développement d'un film photosensible déposé sur le substrat). Il faut cependant garantir l'alignement entre la plaque et les motifs dessinés par les précédentes lithographies et la précision de la reproduction des motifs. On utilise actuellement couramment une méthode optique, mais elle est limitée par sa résolution (motifs de $0.2 \mu m$). La méthode d'avenir d'écriture directe sur photorésiste par faisceau d'électrons [8, 9] dépasse ces limites de résolution [10] ($0.05 \mu m$ et peut-être moins), sans poser le problème de la fabrication du masque. Il faudra malgré tout minimiser le coût de la machine et développer la sensibilité du photorésiste, afin de diminuer le long temps nécessaire à l'impression.
- **gravure:** cette étape se sert des motifs dessinés par lithographie pour ne graver que certaines parties de la plaque. Deux types de gravures peuvent être différenciés: i) gravure en milieu humide (isotropique) [11]; ii) gravure en plasma (isotropique ou anisotropique) [12, 13]. La sélectivité et l'uniformité de la gravure sont les deux critères les plus importants pour améliorer la technologie et la densité d'intégration. La

solution se trouve dans l'utilisation de plasmas très denses à une énergie pas trop élevée, pour éviter d'abimer la surface de la plaque, et pour un contrôle plus précis. L'optimisation de cette étape étant délicate, on s'aide de plus en plus de la simulation pour son étude et son aboutissement.

– **oxydation du silicium:** on utilise la propriété du silicium à s'oxyder très facilement, en présence des oxydants H_2O et O_2 , pour les applications suivantes:

1. masque d'implantation ou de diffusion des dopants dans le Si,
2. passivation de la surface du silicium,
3. isolant entre les dispositifs,
4. diélectrique pour la capacité CMOS.

L'oxydation du silicium est un procédé thermique effectué dans des fours à une température variant de 800°C à 1100°C , en milieu humide (H_2O) ou sec (O_2). Cette méthode favorisant cependant la contamination, on s'oriente maintenant vers des solutions de remplacement. Dans le paragraphe I.3.2, nous reviendrons plus longuement sur l'utilisation de l'oxyde de silicium comme isolant entre les dispositifs.

– **implantation:** elle permet de faire varier de manière précise, contrôlable et répétable les caractéristiques électriques des zones déterminées sur la plaque par lithographie ou par croissance de l'oxyde de silicium. Les espèces atomiques ionisées (Bore, Phosphore, Arsenic...) puis accélérées à haute énergie vont venir pénétrer la plaque [14]. Il est donc essentiel d'utiliser une lithographie précise, afin que seules les zones désirées soient implantées. Cette étape peut amorphiser la surface de la plaque: elle est alors régénérée par recuits et plus exactement par procédé thermique rapide (RTP) pour éviter une trop grande diffusion des dopants.

– **procédé thermique rapide (RTP):** chaque étape thermique était réalisée auparavant dans un four pouvant contenir un chariot de 20 à 100 plaques, mais favorisant la contamination. Celle-ci est de plus en plus souvent réalisée par RTP [15]. Cette technique ne charge les plaques qu'une par une dans le four. Celle-ci est alors placée horizontalement et chauffée rapidement par des lampes halogènes au tungstène, dans les conditions atmosphériques, ou à basse pression, permettant l'oxydation (RTO) [16], le dépôt d'un film (RTCVD) [17] ou le recuit (RTA: "Rapid Thermal Annealing" en anglais) [18]. Son avantage est de travailler dans un milieu contrôlé, avec une masse thermique faible,

et des vitesses de chauffage rapides. C'est l'équipement d'avenir de la fabrication, malgré son coût et le fait qu'une seule plaque peut être traitée à la fois. La solution est d'effectuer un certain nombre d'étapes du procédé dans un appareil multichambre.

- **métallisation**: ce procédé a pour but de connecter les dispositifs entre eux au moyen de lignes métalliques microscopiques qui forment le circuit. Ces lignes, malheureusement, introduisent des résistances [19] et des capacités parasites, dégradant les performances des dispositifs. Elles peuvent aussi se rompre sous l'effet du courant. Il faut donc trouver des matériaux qui évitent ces effets. On utilise actuellement un alliage, déposé par sputtering, de cuivre, d'aluminium et de silicium. De nouveaux développements prévoient l'utilisation de cuivre [20, 21], d'argent [22] ou d'or [23], pour s'affranchir du problème d'électromigration de l'aluminium.

Avec la fabrication du premier circuit intégré en 1958, réunissant sur un même substrat plusieurs dispositifs, la nécessité d'isoler les transistors entre eux est apparue [24]. L'étape d'isolement est en fait un des aspects les plus critiques dans la fabrication des circuits intégrés.

Le premier type d'isolation utilisé est l'isolation de jonction qui doit empêcher l'établissement de canaux parasites entre les dispositifs adjacents. Cependant, avec la réduction des dimensions, les limites de son efficacité sont atteintes. C'est alors que l'on a commencé à s'intéresser aux structures d'isolation issues de l'oxydation sélective du silicium. La technique développée la plus importante est l'isolement LOCOS (Oxydation LOCALE du Silicium), qui consiste en la formation d'un oxyde à moitié enterré dans les zones non actives du substrat (ou zones de champ). Par la suite, pour répondre aux difficultés impliquées par l'augmentation de l'intégration, de nouveaux procédés d'isolation sont requis. Les exigences demandées pour ces structures ainsi que les modifications apportées au procédé de fabrication sont décrites dans le paragraphe suivant.

I.3.2 L'étape d'isolement

L'isolement latéral des circuits CMOS submicroniques doit remplir plusieurs critères:

- réaliser un espace minimum entre les dispositifs,
- assurer une isolation électrique entre les dispositifs d'un même caisson (intra-caisson) et entre les caissons (inter-caisson),

- être obtenu par un procédé simple et compatible avec la technologie développée,
- ne pas dégrader les performances des dispositifs actifs.

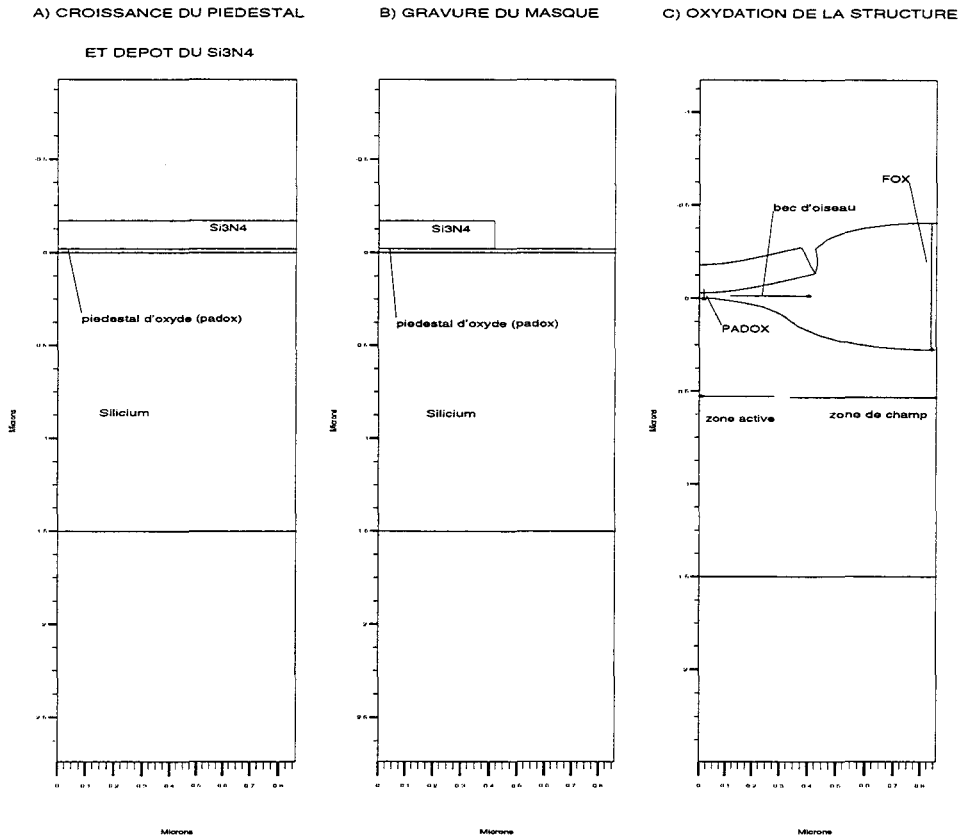


Figure I.5 – Etapes de la fabrication d'une structure LOCOS: A) Croissance du piédestal d'oxyde (ou "padox" en anglais: pad oxide) et dépôt du film de nitrure (Si_3N_4); B) Gravure du nitrure; C) Croissance thermique de l'oxyde de champ (ou "fox" en anglais: field oxide) en milieu humide.

Au début des années 1970, Kooi et al. [2] a montré l'intérêt d'une oxydation localisée du silicium pour isoler entre eux les dispositifs. L'isolement de type LOCOS (Oxydation LOCALE du Silicium) est donc inventé et rempli avec succès les critères précédents. Il est fabriqué par oxydation sélective du substrat de silicium. Ce sont des masques de nitrure qui permettent de sélectionner la partie à oxyder. La figure I.5 décrit la fabrication d'un LOCOS. Sur le schéma du LOCOS, les termes communément utilisés pour désigner certaines grandeurs géométriques sont indiquées.

Cette technique a été utilisée et améliorée jusqu'au début des années 80. A ce moment, plusieurs autres techniques sont apparues, afin de palier aux défauts du LOCOS. En particulier, on a cherché à diminuer l'empiètement de l'oxyde de champ sur la zone active (bec d'oiseau), qui apparaît lors de l'oxydation du silicium sous les bords du masque de nitrure. Les techniques qui ont donné les meilleurs résultats sont:

- le **PBL (Polysilicon Buffer LOCOS)** [26]: le masque de nitrure est rendu plus rigide en augmentant son épaisseur. Pour éviter la génération de défauts cristallins dans le substrat, à cause de l'épaisseur du masque, une couche de polysilicium est déposée entre le piédestal d'oxyde et le nitrure (figure I.6):

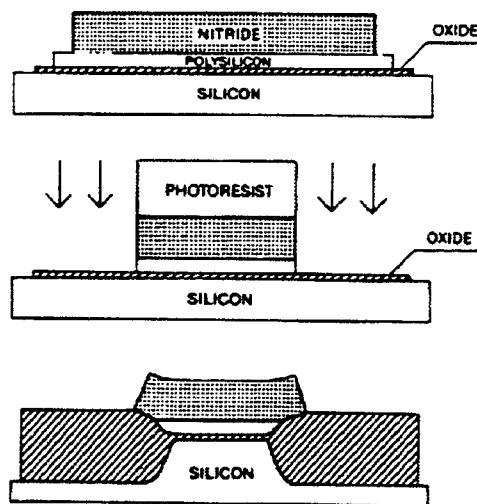


Figure I.6 - Etapes de fabrication d'une structure PBL: A) Croissance du piédestal d'oxyde, dépôt d'un film de polysilicium et dépôt du film de nitrure (Si_3N_4); B) Gravure du nitrure et du polysilicium; C) Croissance thermique de l'oxyde de champ en milieu humide. Notons l'amincissement du bec d'oiseau dû à la présence du polysilicium.

- le **NCLAD-LOCOS**: "clad" signifie "vêtement". Ici, le masque de nitrure est "revêtu" d'une seconde couche de nitrure, comme il est indiqué sur la figure I.7. L'intérêt de ces structures est que les "bouchons" situés aux bords inférieurs des masques diminuent l'oxydation latérale en réduisant la diffusion d'oxydants sous le masque. Ici, l'efficacité des structures réside dans la résistance du nitrure au phénomène d'oxydation.

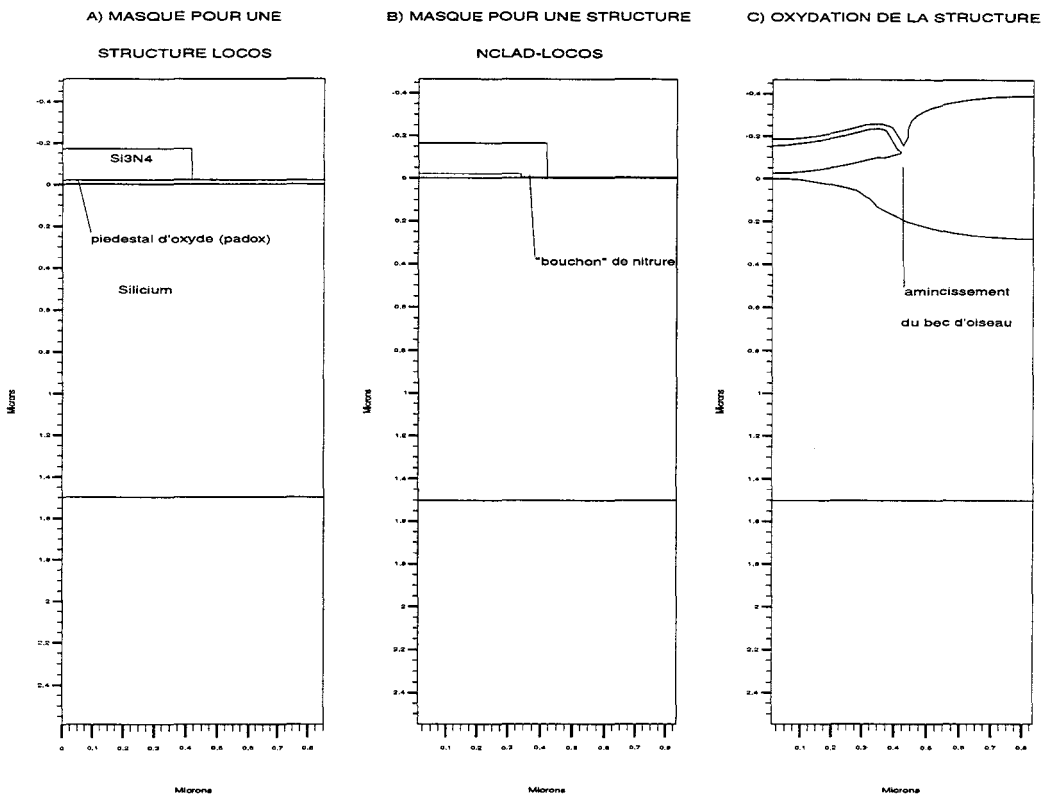


Figure I.7 – Etapes de la fabrication d’une structure NCLAD-LOCOS: A) Masque pour une structure LOCOS; B) Masque pour une structure NCLAD-LOCOS: un “bouchon” de nitrure est ajouté au bord inférieur du masque de nitrure; C) Oxydation de la structure en milieu humide. On observe un amincissement du bec d’oiseau par rapport à la structure de la figure I.5 C).

- le **SILO** (Sealed Interface Local Oxidation) [27]: un film de nitrure est ajouté directement à la surface du silicium, sous l’oxyde formant le piédestal, afin de réduire l’oxydation latérale, et la formation du bec d’oiseau (figure I.8 a)). Le nitrure I s’oppose à la réaction d’oxydation sous le masque, tandis que l’oxyde entre les deux couches de nitrure permet l’absorption des contraintes issues du nitrure II, prévenant ainsi les dislocations dans le silicium:

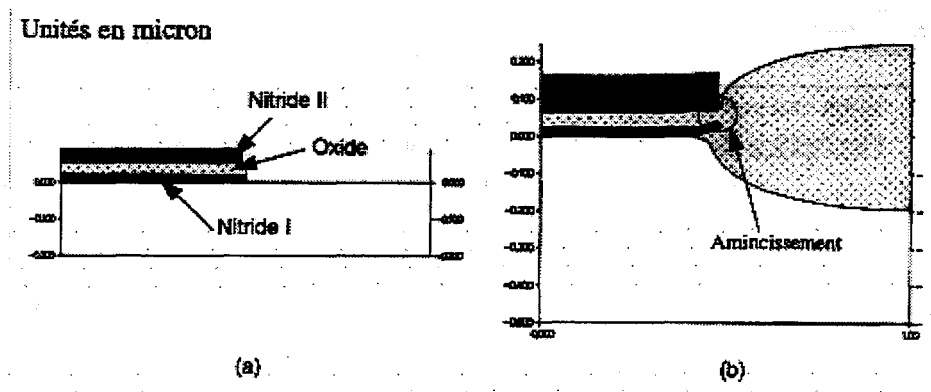


Figure I.8 – Etapes de fabrication d'une structure SILO: a) Masque d'oxydation, b) Oxydation de la structure. L'aminçissement, indiqué par un cercle sur la figure, met en évidence son rôle d'absorbeur des contraintes.

- **l'isolement BOX (Buried Oxide)**: cette technique est née des travaux de Kurosawa et al. [1]. Elle constitue une rupture technologique par rapport au procédé LOCOS. Elle consiste à graver une tranchée d'environ $0.4 \mu\text{m}$ de profondeur dans le silicium, de remplir cette tranchée avec un oxyde déposé, et enfin d'aplanir cet oxyde dans le but d'obtenir un oxyde de champ parfaitement planarisé. Elle apparaît comme une solution d'avenir puisqu'elle permet de combiner à la fois: i) un bec d'oiseau de largeur nulle, ii) une oxydation de champ enterrée avec une épaisseur importante, iii) un isolement latéral étroit. Elle possède cependant deux inconvénients majeurs: elle génère de nombreux défauts cristallins et son procédé est complexe. Elle est en cours de développement à STMicroelectronics à Crolles (France), depuis 1996, pour la technologie des CMOS $0.25 \mu\text{m}$.

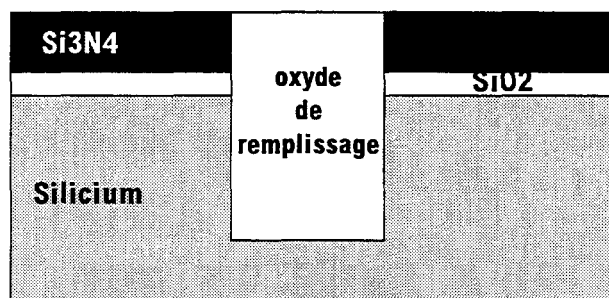


Figure I.9 – Exemple d'une structure BOX. Il n'y a pas de bec d'oiseau; l'oxyde de champ est profondément enterré; l'isolement latéral est étroit.

Il a été observé que plus l'oxyde de champ était enterré profondément dans le substrat meilleure était l'isolation électrique, créant un "effet de coin" [1]. Pour favoriser cet enterrement, une amélioration géométrique est utilisée. Elle consiste à ajouter une étape de gravure du silicium à la fabrication de la structure. Le dérivé correspondant à la structure LOCOS (ou PBL) est le Recessed-LOCOS (ou PBL), ou LOCOS (ou PBL) enterré. Cette structure est décrite sur la figure I.10, à comparer avec celle de la figure I.5.

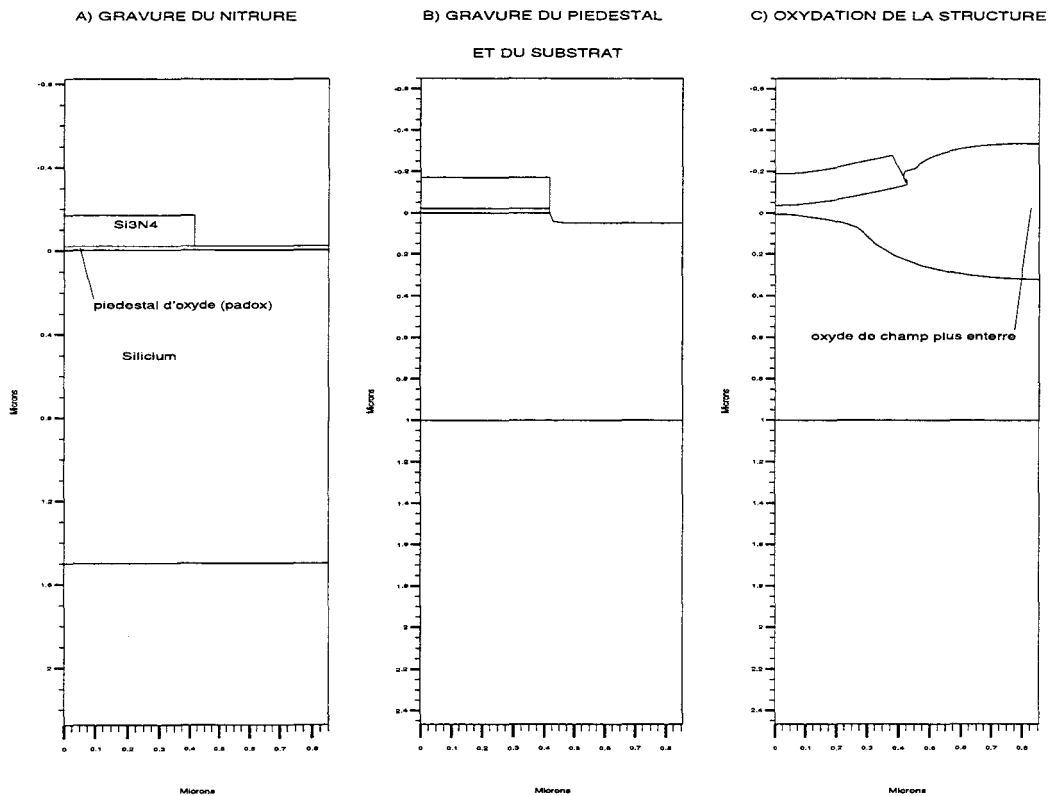


Figure I.10 – Etapes de la fabrication d'une structure LOCOS enterré, à comparer avec la figure I.5: A) Gravure du nitrure; B) Gravure du piédestal d'oxyde et du substrat de silicium; C) Oxydation de la structure en milieu humide. On observe un oxyde de champ plus enterré, bien que moins épais à cause des plus fortes contraintes contenues dans l'oxyde.

Chez STMicroelectronics, des structures de type enterré (PBL ou LOCOS) sont utilisées pour les CMOS de petites dimensions ($0.5 \mu\text{m}$, $0.35 \mu\text{m}$), en remplacement de leur équivalent non enterré.

Afin de réduire les dimensions des structures d'isolement, il faut agir sur les paramètres géométriques et sur ceux du procédé de fabrication:

- **le masque de nitrure de silicium et le piédestal d'oxyde [30]:** le masque de nitrure empêche l'oxydation du silicium au niveau des zones actives. Cependant, le nitrure possède de fortes contraintes intrinsèques, créées au cours de son dépôt. C'est pourquoi il est nécessaire d'insérer un piédestal d'oxyde entre le nitrure et le silicium afin d'absorber les contraintes que le masque de nitrure pourrait générer dans le substrat. C'est la présence de ce piédestal qui favorise la création du bec d'oiseau par diffusion des agents oxydants dans le piédestal. A l'extrême, si le nitrure est étroit, cas fréquemment rencontré dans les petites structures d'isolement, un autre phénomène intervient: le perçage du piédestal d'oxyde, dû à l'oxydation latérale. Celui-ci est d'autant plus important que l'épaisseur du piédestal d'oxyde est importante. Ce phénomène doit être minimisé, si ce n'est éliminé, puisque par la suite il faudra graver l'oxyde jusqu'au silicium au niveau de la zone active. Enfin, un autre phénomène doit être pris en compte lorsque l'espacement entre les masques de nitrure diminue. Il s'agit de l'amincissement de l'oxyde de champ. En effet, cette réduction de l'espacement augmente le niveau de contraintes, qui entraîne le ralentissement de la croissance de l'oxyde. Il faut donc trouver un compromis entre les caractéristiques géométriques du nitrure (largeur et épaisseur) et l'épaisseur du piédestal d'oxyde afin que ces phénomènes soient réduits.
- **gravure du silicium [31]:** elle permet d'avoir un meilleur isolement, puisque l'oxyde de champ est enterré. La structure possède aussi une surface plus plane et donc favorise la planarité du dispositif. De plus ce type de structures favorise l'oxydation latérale et le perçage augmente avec la profondeur de la gravure. Cette dernière doit donc être optimisée afin de permettre un compromis entre ces deux phénomènes.
- **les conditions d'oxydation [32]:** ce sont la température, la pression et l'ambiance d'oxydation. Elles ont le pouvoir de modifier la vitesse d'oxydation du silicium et les propriétés mécaniques de chaque matériau utilisé, provoquant un changement dans la topologie et le niveau de contraintes de la structure oxydée.

La performance d'une isolation est liée non seulement aux compromis géométriques, mais aussi au niveau des contraintes générées dans le substrat. L'optimisation de tous ces paramètres, pas toujours mesurables facilement (comme les contraintes), nécessite la réalisation d'une grande quantité d'expériences coûteuses et longues. C'est la raison pour laquelle les outils de

simulation sont de plus en plus utilisés, dans le domaine de la Recherche et du Développement. Ils deviennent même indispensables pour l'avancée technologique des dispositifs, en termes de réduction de coût et de temps de développement.

I.4 Les outils de simulation

I.4.1 Historique et description

Lors de la mise en place d'un nouveau procédé, il est très important de pouvoir prédire les changements qu'il apportera aux paramètres électriques du circuit ou du dispositif. Tout au début de l'ère de la microélectronique, les caractéristiques électriques des dispositifs étaient estimées en calculant les profils de dopants dans le silicium et l'oxyde à l'aide de simples modèles analytiques mono-dimensionnels. Ils étaient ensuite comparés aux résultats des mesures.

Avec la réduction de la taille des dispositifs, une telle approche est inadéquate. En effet, les effets bi-dimensionnels font dévier de manière significative les caractéristiques prévues par les modèles analytiques 1D. Comme il faudrait réaliser un trop grand nombre de mesures pour trouver des modèles analytiques adéquats pour chaque procédé, il a été choisi d'utiliser des outils numériques de simulation du procédé de fabrication. Les informations concernant la structure du dispositif (profils des dopants, topologie...) fournies par la simulation de procédé, sont ensuite utilisées dans la simulation de dispositifs, pour calculer les caractéristiques électriques du dispositif.

L'intérêt d'utiliser des programmes de simulation réside dans le moindre coût en temps et argent par rapport aux expériences. De plus, cette approche fournit des informations détaillées sur les opérations de la fabrication du dispositif dans un environnement bien contrôlable.

Nous nous intéresserons dans la suite aux programmes de simulation de procédés de fabrication, supports importants de cette thèse.

I.4.2 La simulation de procédés

Très vite, dans l'histoire des circuits intégrés, des programmes de simulations numériques des procédés sont apparus (SUPREM II en 1979), afin d'aider le développement des dispositifs.

Au cours de la fabrication se succèdent des étapes de dépôts, gravures, implantations, oxydations, diffusions... toutes exploitant des phénomènes physiques différents. On voudrait, de manière idéale, avoir un simulateur qui soit à même de reproduire exactement chacun de ces phénomènes. Des problèmes différents sont à résoudre selon que l'on veut réaliser la simulation de l'un ou de l'autre. C'est pourquoi, l'évolution des simulateurs ne procède pas de manière uniforme.

Au début des années 80, les premiers simulateurs bidimensionnels, tels que ICECREM II [33], SUPRA [34], TITAN IV [35], ne pouvaient simuler que la redistribution des dopants, c'est à dire l'étape de diffusion. A la fin de ces années, les simulations de photolithographie, de gravure et de dépôt étaient disponibles [22]. Cette lente évolution s'explique par:

- le manque de connaissance de la physique des phénomènes à simuler,
- le manque d'algorithmes robustes et rapides en adéquation avec la puissance de calcul,
- le manque de moyens mis en oeuvre pour le développement de ces simulateurs.

La simulation de l'oxydation bidimensionnelle de surfaces non planes de silicium, qui sera largement décrite dans ce manuscrit, est l'une des étapes les plus difficiles à simuler, en raison des nombreux phénomènes physiques qu'elle met en jeu et de la complexité des changements qu'elle induit dans la structure.

Cependant, les simulateurs de procédés actuels bidimensionnels, tels que ATHENA [37], IMPACT-4 [38], STORM [47] permettent de prendre en compte des topologies complexes multicouches, et leurs évolutions, et de modéliser avec précision les différents procédés technologiques.

I.4.3 Interaction entre simulateurs et réalité

Il est essentiel de maintenir un lien entre la simulation (de procédé ou de dispositifs) et la réalité (procédé de fabrication d'un dispositif). Le schéma de la figure I.11 représente leurs interactions [40].

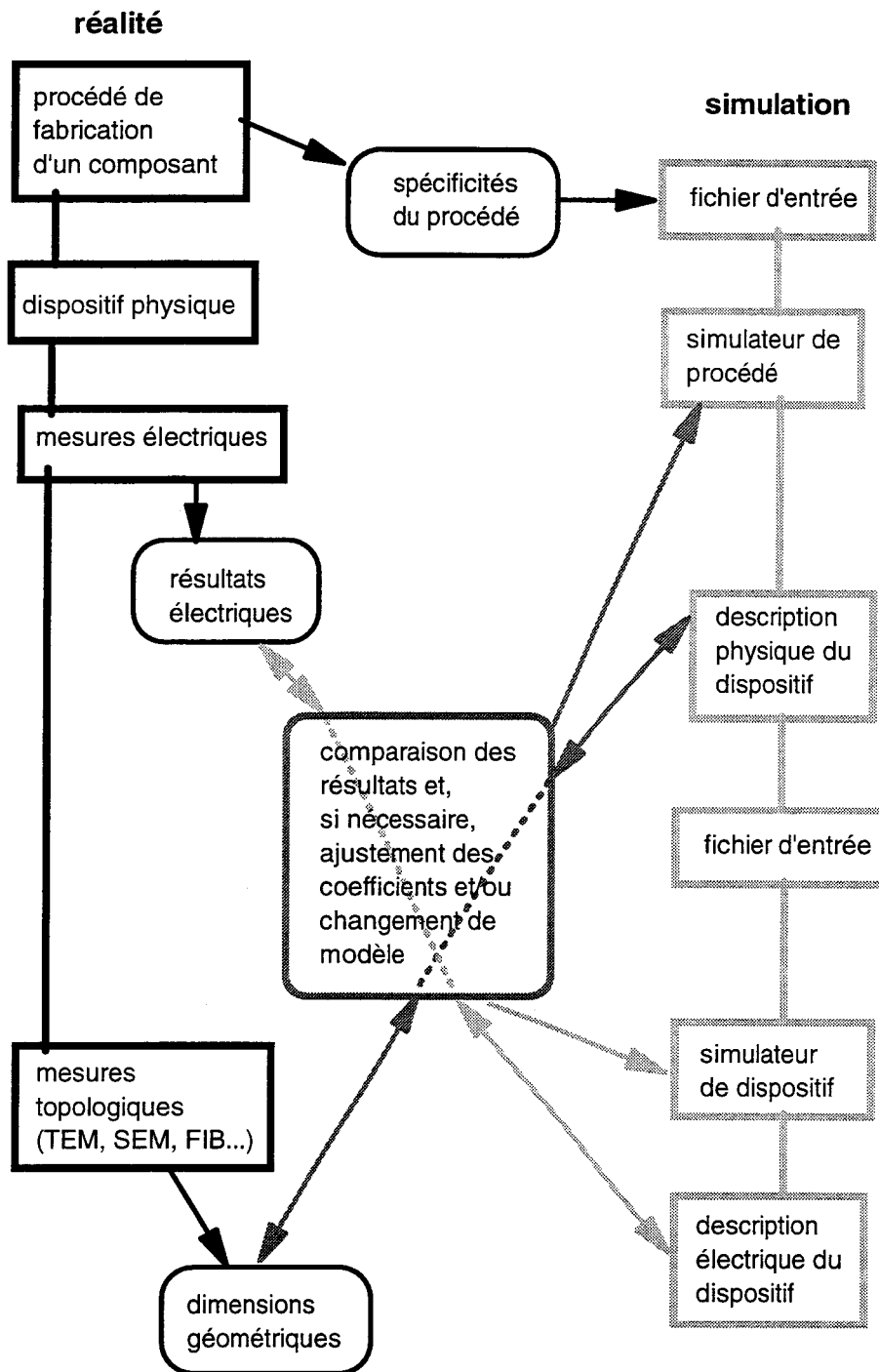


Figure I.11 – Interactions entre le procédé de fabrication des composants électroniques et les différents simulateurs. En couplant l'analyse des résultats des simulations et les mesures, on peut optimiser le procédé.

Les dispositifs réalisés selon un procédé de fabrication sont soumis à deux types de mesures, afin de vérifier le bon comportement de leurs caractéristiques et la validité du procédé choisi. Ce sont: i) les mesures électriques (résultats électriques), ii) les mesures topologiques (dimensions géométriques obtenues par TEM, SEM, FIB...).

En parallèle, les simulations sont réalisées. Le fichier d'entrée de toute simulation de procédé contient la description de l'ensemble des modules (dépôt, gravure, oxydation...) et les spécificités du procédé (température, pression, épaisseur des films déposés, largeur et profondeur des gravures...). La simulation de procédé réalise donc un dispositif virtuel. Les profils des dopants simulés servent ensuite de données d'entrée au simulateur de dispositifs. Celui-ci va permettre de calculer les caractéristiques électriques.

Cependant, un programme de simulation pris tel quel ne permet généralement pas de reproduire avec succès la fabrication d'un procédé, à partir d'une simple description théorique de celles-ci. En effet, les modèles actuellement utilisés relèvent encore en partie de l'empirisme et nécessitent donc d'être calibrés. C'est pourquoi il est absolument essentiel de vérifier le choix du modèle et les valeurs des paramètres, en confrontant les résultats expérimentaux aux simulations. Ensuite, si ces résultats ne sont pas superposables, il faut, soit changer de modèle, soit procéder à une calibration des coefficients impliqués. Chaque modification est suivie d'une nouvelle simulation du dispositif, et d'une confrontation avec les mesures. Cette étape d'ajustement nous assure de pouvoir utiliser le simulateur pour prévoir, avec confiance, les effets de petites variations du procédé sur le dispositif électrique.

Afin d'être suffisamment prédictifs, les programmes de simulations doivent donc non seulement utiliser des modèles physiques valables, mais aussi être suffisamment bien calibrés pour pouvoir atteindre leurs buts: i) reproduire la réalité, dans de larges intervalles des valeurs des paramètres du procédé, et ii) aider à l'optimisation des étapes du procédé de fabrication.

I.5 Organisation du manuscrit

Dans la première partie (Chapitre II) de cette thèse, nous nous sommes appliqués à calibrer le modèle d'oxydation du programme de simulation IMPACT-4, pour des structures d'isolement de petites dimensions (comprises entre $2\ \mu\text{m}$ et $1\ \mu\text{m}$), afin d'avoir un simulateur prédictif pour des intervalles suffisamment larges des paramètres de procédé. Cette calibration a été effectuée à l'aide de plans d'expériences et de la méthode RSM (Technique d'Analyse statistique), et en s'aidant de la confrontation avec des résultats

expérimentaux (photos SEM). Cette calibration a permis de simuler avec succès l'ensemble des structures présentées dans ce manuscrit.

Dans la recherche de structures d'isolement toujours plus performantes, et plus petites, STMicroelectronics s'est intéressée à l'étude de la structure d'isolement de type NCLAD. La simulation d'une telle structure nécessite la prise en compte de l'oxydation du nitrure: nous avons donc étudié un modèle pour l'oxydation du nitrure. Ce modèle a été implanté dans IMPACT-4. Ceci nous a permis de simuler des NCLAD, d'étudier leur topologie et d'en déduire leur efficacité pour les structures d'isolement de la nouvelle génération CMOS 0.35 μm . Le chapitre III décrit l'étude réalisée autour de cette structure.

Enfin, au cours de la fabrication de structures d'isolement, de fortes contraintes, liées aux spécificités du procédé, sont générées dans le substrat (de l'ordre de $\pm 10^{+9} \text{ dynes/cm}^2$), risquant de dégrader les caractéristiques électriques des dispositifs. Il est donc très important de pouvoir les contrôler pour pouvoir y remédier. Les simulations permettent de les calculer et donc de les étudier. Cependant, pour être certains de la validité de la méthode utilisée pour les calculer, il est nécessaire de confronter les valeurs obtenues avec des résultats expérimentaux. Le Chapitre IV présente une méthode de mesure des contraintes, par Diffraction Electronique à Rayon Convergent (CBED). Les résultats ont été confrontés, avec succès, avec les simulations correspondantes des différentes structures d'isolement étudiées.

Bibliographie

- [1] G. Moore, "VLSI, What Does the Future Hold", *Electron. Aust.*, **42**, (1980), p. 14.
- [2] W. Myers, "The Drive to the Year 2000", *IEEE Micro.*, **11**, (1991), p. 10.
- [3] C.Y. Chang, S.M. Sze, "ULSI Technology", *McGraw-Hill Companies, Series in Electrical and Computer Engineering*, (1996), p. xxi.
- [4] C.Y. Chang, S.M. Sze, "ULSI Technology", *McGraw-Hill Companies, Series in Electrical and Computer Engineering*, (1996), p. xxii.
- [5] W. Kern, G.L. Schnable, "Low Pressure Chemical Vapor Deposition for VLSI Processing - A Review", *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **ED-26**, (1979), p. 647.
- [6] M. de Fraiteur, J. Goldman, "Pressure Control in LPCVD System", *Semic. Intl.*, (May 1984), p. 250.
- [7] B. Gorowitz, T.B. Gorczyca, R.J. Saia, "Application of PECVD in VLSI", *Sol. State Technol.*, (June 1985), p. 197.
- [8] M. Fujita, K. Shiozawa, T. Kase, H. Hayakawa, F. Mizuno, R. Haruta, F. Murai, S. Okazaki, "Application and Evaluation of Direct-Write Electron Beam for ASIC's", *IEEE J. Solid State Circuits*, **23**, (1988), p. 514.
- [9] F. Murai, Y. Nakayama, I. Sakama, T. Kaga, Y. Nakagome, Y. Kawamoto, S. Okazaki, "Electron Beam Direct Writing Technology for 64-Mb DRAM LSIs", *J. Appl. Phys.*, **29**, (1990), p. 2590.
- [10] K.L. Lee, M. Hatzakis, "Direct Electron-Beam Patterning for Nanolithography", *J. Vac. Sci. Technol.*, **B-7**, (1989), p. 1941.
- [11] C.Y. Chang, S.M. Sze, "ULSI Technology", *McGraw-Hill Companies, Series in Electrical and Computer Engineering*, (1996), p. 364-366.

- [12] J.W. Coburn, "Plasma-assisted Etching", *Plasma Chem. and Plasma Process.*, **2**, (1982), p. 1.
- [13] D.B. Graves, "Plasma Processing in Microelectronics Manufacturing", *AIChE J.*, **35**, (1989), p. 1.
- [14] C.Y. Chang, S.M. Sze, "ULSI Technology", *McGraw-Hill Companies, Series in Electrical and Computer Engineering*, (1996), p. 327-370.
- [15] R.B. Fair, "Rapid Thermal Processing - A Justification", in R.B. Fair, Ed., *Rapid Thermal Processing: Science and Technology*, 4th ed., Blackie and Son, Ltd., Glasgow, 1955.
- [16] H.Z. Massoud, "Rapid Thermal Growth and Processing of Dielectrics", in R.B. Fair, Ed., *Rapid Thermal Processing: Science and Technology*, Academic Press, Boston, 1993.
- [17] R. Miller, M.C. Ozturk, J.J. Wortman, F.S. Johnson, D.T. Grider, "LPCVD of Silicon Dioxide by Pyrolysis of TEOS in a Rapid Thermal Processor", *Mat. Lett.*, **8**, (1989), p. 353.
- [18] M.C. Ozturk, J.J. Wortman, Y. Zhong, X. Ren, R.M. Miller, F.S. Johnson, D.T. Grider, D.A. Abercrombie, in *Rapid Thermal Annealing/Chemical Vapor Deposition and Integrated Processing Symposium*, MRS Symposia Proceedings, **146**, (1989), p. 109.
- [19] K.K. Ng, W.T. Lynch, "The Impact of Intrinsic Series Resistance on MOSFET Scaling", *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **ED-34**, (1987), p. 503.
- [20] J.S.H. Cho, H.K. Kang, I. Asano, S.S. Wang, "CVD Cu Interconnection for ULSI", *Tech. Dig. IEDM*, (1992), p. 297.
- [21] N. Misawa, S. Kishii, T. Ohba, Y. Arimoto, Y. Furumura, H. Tsutikawa, "High Performance Planarized CVD-Cu Multi-Interconnection", *Proc. of the 10th International VLSI Multilevel Interconnection Conference*, (1993), p. 353.
- [22] Y. Ushiku, H. Ono, T. Iijima, N. Ninomiya, A. Nishiyama, H. Iwai, H. Hara, "Planarized Silver Interconnect Technology with a Ti Self-Passivation Technique for Deep Submicron ULSIs", *Dig. Tech. Papers, Symp. on VLSI Technol.*, (1993), p. 121.
- [23] K. Urabe, T. Katoh, Y. Murao, "Fully Planarized Multilevel Gold Metallization with Gap Filled Wires", *Proc. of the 10th International VLSI Multilevel Interconnection Conference*, (1993), p. 366.

- [24] J.S. Kilby, "Invention of the Integrated Circuit", *IEEE Trans. Elec. Dev.*, **2**, no. 7, (Jul 1976) p. 648.
- [25] J.A. Appels, E. Kooi, "Local Oxidation of Silicon and its Application in Semiconductor-device technology", *Philips Res. Repts*, **25**, (1970), p. 118.
- [26] M. Ghezzi, E. Kaminsky, Y. Nissan-Cohen, P. Frank, R. Saia, "LOPOS: Advanced Device Isolation for 0.8 μm CMOS/Bulk Process Technology", *J. Electrochem. Soc.*, **136**, no. 7, (1989), p. 1992.
- [27] S. Deleonibus, F. Martin, "Exploration of LOCOS-type isolation limit using SUPERSILO Isolation by Rapid Thermal Nitridation of Silicon", *J. Electrochem. Soc.*, **140**, n° 10, (Oct 1993), p. 2908.
- [28] K. Kurosawa, T. Shibata, "A New Bird's-beak Free Field Isolation Technology for VLSI Devices", *IEDM'81*, (1981), p. 384.
- [29] S.H. Goodwin and J.D. Plummer, "Electrical Performances and Physics of Isolation Region Structures for VLSI", *IEEE Trans. Elec. Dev.*, **31**, no. 7, (Jul. 1984), p. 861.
- [30] P.A. van der Plas, N.A.H. Wils, R. de Werdt, "Geometry Dependent Bird's Beak Formation for Submicron LOCOS Isolation", *ESSDERC'89*, (1989), p. 131.
- [31] E. Bassous, H.N. Yu, V. Maniscalco, "Topology of Silicon Structures with Recessed SiO_2 ", *J. Electrochem. Soc.*, **123**, no. 11, (1976), p. 1729.
- [32] T.C. Wu, W.T. Stacy, K.N. Ritz, "The Influence of the LOCOS Processing Parameters on the Shape of the Bird's Beak Structure", *J. Electrochem. Soc.*, **123**, no. 11, (1983), p. 1563.
- [33] H. Ryssel, K. Habberger, K. Hoffmann, G. Prinke, R. Dumcke, A. Sachs, "Simulation of Doping Processes", *IEEE Trans. Elec. Dev.*, **27**, no. 8, (Jul. 1980), p. 1484.
- [34] D. Chin, M.R. Kump, H.G. Lee, R.W. Dutton, "Process Design using Two-dimensional Process and Device Simulators", *IEEE Trans. Elec. Dev.*, **29**, no. 2, (1982), p. 336.
- [35] A. Gérodolle, S. Martin, A. Marroco, "Finite Element Method Applied to 2D MOS Process Simulation and Defect Diffusion: Program TITAN", *Conf. Proc., Nascocod IV, Ireland*, (1985), p. 287.
- [36] C.S. Rafferty, "Stress Effects in Silicon Oxidation - Simulation and Experiments", *Ph. D. Thesis, Stanford University, California*, (Dec. 1989).

- [37] P.J. Hopper, P.A. Blakey, "The MASTER Framework", *Microelec. J.*, **26**, (1995), p. 177.
- [38] B. Baccus, E. Dubois, D. Collard, D. Morel, "Efficient two dimensional Multilayer Process Simulation of Advanced Bipolar Devices", *Solid State Elect.*, **53**, (1991), p. 391.
- [39] S.K. Jones, C. Lombardi, A. Poncet, C. Hill, H. Jaouen, J. Lorenz, C. Lyden, K. De Mayer, J. Pelka, M. Rudan, S. Solmi "STORM: a European Platform for Submicron Technology Simulation and Optimisation", *ESSDERC'93*, (1993), p. 505.
- [40] C. de Diana, "Analisi Costruttiva e Simulazione di Processo di una Tecnologia CMOS per Memorie non Volatili ad alta Densità", *Ph. D. Thesis, Università di Milano, Italie*, (1994).

Chapitre II

Calibration du programme de simulation IMPACT-4

La simulation de technologie permet à partir de données propres au procédé de fabrication (température, pression, dimensions...) de prédire la structure physique du composant électronique: topologie, dopages et contraintes mécaniques. Pour que la simulation soit prédictive, il faut implanter des modèles qui soient les plus physiques possible. Etant donné qu'il est impossible d'incorporer tous les mécanismes physiques mis en jeu lors de la fabrication de composants intégrés, soit qu'ils ne sont pas complètement compris, soit qu'ils requièrent un temps de calcul trop important, il est nécessaire d'avoir recours à des paramètres d'ajustement. Le but est alors de pouvoir calibrer ces paramètres de manière à ce que le modèle reste prédictif sur la plus large gamme de variations.

Ce chapitre présente une méthodologie de calibration du modèle d'oxydation du silicium, modèle que l'on trouve dans la plupart des simulateurs de technologie. Ce travail est absolument fondamental pour la simulation de technologie qui reste une activité en pleine évolution. Il vise à contribuer à la définition de modèles génériques (c'est à dire utilisés par tous les outils du marché) pour lesquels une seule et même méthode de calibration est adoptée par l'ensemble de la communauté. Ainsi il est plus facile de comparer les résultats, d'améliorer la modélisation et de favoriser l'interchangeabilité des programmes.

Chez STMicroelectronics, les structures d'isolation sont passées en deux ans de la dimension ("pitch" en anglais, c'est à dire largeur de la période de la structure) de $2.00 \mu m$ (CMOS $0.60 \mu m$) à $1.45 \mu m$ ou $1.30 \mu m$ (CMOS $0.40 \mu m$). Avec la technologie CMOS $0.35 \mu m$, les structures d'isolement ont des dimensions de $1.20 \mu m$ à $1.00 \mu m$. Pour ces technologies, la structure d'iso-

lation est le LOCOS enterré [1]. Pour des technologies encore plus avancées (CMOS $0.25 \mu m$), on utilisera la structure "SHALLOW TRENCH" (STI) avec des pitch de $0.75 \mu m$ [1].

Calibrer le modèle d'oxydation du silicium de manière à ce qu'une unique série de paramètres puisse prédire l'ensemble des résultats obtenus avec ces technologies est un véritable challenge.

En effet, la calibration dépend de nombreux facteurs: technologie utilisée, domaine d'étude (température, topologie, milieu atmosphérique...), etc... Pour effectuer une calibration qui soit applicable à un large ensemble de résultats, il faut tout d'abord utiliser un modèle d'oxydation du silicium intégrant de nombreux effets physiques et déterminer les paramètres empiriques qu'il faut ajuster.

Ce modèle et ses paramètres sont décrits, dans le cas de l'oxydation du silicium, dans la section II.1. Une première calibration est effectuée pour des structures "larges" (pitch= $2 \mu m$) de type LOCOS. Sa méthode et les résultats obtenus sont décrits dans la section II.2. Malheureusement, cette calibration n'est pas applicable à des structures plus petites (pitch= $1.45 \mu m$ ou moins) de type LOCOS enterré. Il a donc été nécessaire de modifier la méthode de calibration et de réitérer la procédure de calibration comme cela est rapporté à la section II.3.

II.1 Description du modèle d'oxydation du silicium

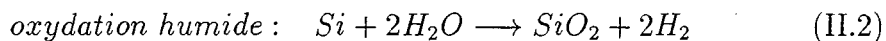
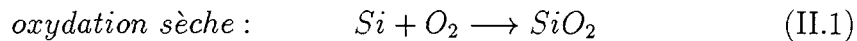
Le programme de simulation que nous avons utilisé tout au long de ce travail est IMPACT-4 (Isen Modeling PAckage for integrated Circuit Technology). Il a été développé au sein du laboratoire de l'Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord (IEMN) à Lille, France. Ce programme est capable de simuler les étapes d'implantation, de dépôt, de gravure, d'épitaxie et de recuit thermique en ambiance neutre et oxydante [3]. La cinétique d'oxydation du silicium est fortement influencée par la géométrie (plane ou non) de l'interface silicium/oxyde. Dans le paragraphe II.1.1, nous allons d'abord décrire le modèle unidimensionnel, applicable à des substrats de silicium plans, puis dans un second temps, nous étudierons les modifications liées au cas bidimensionnel. L'oxydation du silicium pour des substrats non plans génère des contraintes dans les matériaux. Elles sont calculées dans les programmes de simulation à l'aide des modèles rhéologiques décrits dans le paragraphe II.1.2. Enfin, les algorithmes utilisés dans IMPACT-4 pour l'oxydation du

silicium sont présentés dans le paragraphe II.1.3.

II.1.1 Modèle d'oxydation mono et bi-dimensionnel

a) Le modèle de Deal et Grove

En présence d'agents oxydants (H_2O ou O_2), le silicium s'oxyde pour former une couche d'oxyde de silicium SiO_2 . Les oxydants diffusent au travers de la couche de SiO_2 déjà formée, avec un coefficient de diffusion $D_o^{(si)}$. Lorsqu'ils atteignent l'interface SiO_2/Si , ils réagissent avec le silicium, suivant une réaction caractérisée par le coefficient k_s . En fonction du type d'agents oxydants, les réactions sont les suivantes:



Deal et Grove ont étudié l'oxydation du silicium. Ils ont déduit un modèle linéaire-parabolique, qui permet d'exprimer l'épaisseur d'oxyde x_{ox} croissant sur un substrat de silicium mono-dimensionnel en fonction du temps d'oxydation t [4]:

$$\frac{x_{ox}^2}{B} + \frac{x_{ox}}{B/A} = t + \tau \quad (\text{II.3})$$

avec B/A et B étant respectivement les coefficients linéaire et parabolique, τ étant le décalage en temps qui permet de tenir compte de l'épaisseur initiale d'oxyde se trouvant sur le silicium au temps $t = 0$.

B/A et B sont fonction des coefficients de diffusion $D_o^{(si)}$ et de réaction k_s :

$$B = 2 \cdot D_o^{(si)} \cdot C^*/N \quad (\text{II.4})$$

$$\frac{B}{A} = \frac{C^*}{N(1/k_s + 1/h)} \simeq \frac{k_s \cdot C^*}{N} \quad (\text{II.5})$$

où N est le nombre de molécules d'oxydants nécessaires à la formation d'un volume unitaire d'oxyde, C^* est la concentration d'équilibre dans l'oxyde (solubilité) et h est le coefficient de transfert de masse. N est égal à $2.2 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ pour l'oxydation sèche, et est deux fois plus important pour l'oxydation humide. h est négligé car il est très grand devant k_s .

Les coefficients B et B/A ont été calculés expérimentalement, pour des intervalles de températures de 800°C à 1200°C et de pressions de 0.1 atm à

1atm, pour des oxydations sèches ou humides.

Cependant, il a été observé que certaines conditions expérimentales augmentaient la vitesse de réaction (présence de composés halogénés [5, 6, 7], fort dopage [8, 9]). De même, Irene a étudié l'effet de l'orientation cristalline du substrat sur la vitesse d'oxydation [10]. Pour incorporer ces effets dans la modélisation, il faut modifier la constante de réaction k_s . Mais d'autres phénomènes, tels la diminution de la vitesse d'oxydation à basse température, ne peuvent être expliqués par le modèle de Deal et Grove, et ne peuvent être traduits par une simple modification de k_s .

b) Limites du modèle de Deal et Grove

Un certain nombre d'expériences qualitatives ont montré la limite du modèle mono-dimensionnel de Deal et Grove:

- observation de l'amincissement de l'épaisseur d'oxyde sur des substrats de forme convexe ou concave [11], influence de la température et du type d'ambiance sur cet amincissement [12],
- observation de l'amincissement de l'oxyde de champ, dans le cas de petites ouvertures de masque de nitrure [13] [14] [15].

C'est grâce à Kao que l'influence des contraintes sur l'oxydation a pu être mesurée quantitativement et expliquée [5] [6]. Ses expériences d'oxydation ont été réalisées sur des cylindres de silicium, convexes ou concaves, de diamètres différents. Il a observé que la vitesse d'oxydation était réduite dans les deux cas, mais qu'elle était encore plus faible dans le cas d'un substrat concave [5]. Il a attribué ces phénomènes à une influence du champ de contraintes, généré par l'oxydation, qui réduisait à la fois le coefficient de diffusion $D_o^{(si)}$ et la constante de réaction k_s .

A partir de ces expériences, une modélisation 2D a été développée, extension du modèle de Deal et Grove dans lequel on tient compte explicitement du champ de contraintes dans l'oxyde.

Dans le cas des structures d'isolement, telles que les LOCOS, la présence des masques de nitrure va également modifier la cinétique de l'oxydation du silicium. En effet, ces masques vont s'opposer plus ou moins fortement, selon leur géométrie et leur caractéristique mécanique à la réaction d'oxydation. Le champ de contraintes résultant va entraîner une réduction non linéaire de $D_o^{(si)}$ et k_s .

c) Calcul de $D_o^{(si)}$ et k_s en fonction des contraintes.

La dépendance de $D_o^{(si)}$ et de k_s en fonction, respectivement, de la pression hydrostatique P de l'oxyde et de la contrainte normale située à l'interface Si/SiO_2 , σ_{nn} , s'exprime par les équations suivantes:

$$D_o^{(\sigma)} = D_o^{(si)} \exp\left(-\frac{PVd}{kT}\right) \quad \text{pour } P > 0 \quad (\text{II.6})$$

$$D_o^{(\sigma)} = D_o^{(si)} \quad \text{pour } P < 0 \quad (\text{II.7})$$

$$k_s^{(\sigma)} = k_s \exp\left(+\frac{\sigma_{nn}V_k}{kT}\right) \quad \text{pour } \sigma_{nn} < 0 \quad (\text{II.8})$$

$$k_s^{(\sigma)} = k_s \quad \text{pour } \sigma_{nn} > 0 \quad (\text{II.9})$$

avec: $D_o^{(si)} = D_0 \exp\left(-\frac{E_d}{kT}\right)$, la diffusivité de l'oxydant dans l'oxyde, caractérisée par une énergie d'activation E_d ; $k_s = k_0 \exp\left(-\frac{E_k}{kT}\right)$, la constante de réaction à l'interface caractérisée par une énergie d'activation E_k ; P , la pression hydrostatique dans l'oxyde; σ_{nn} , la contrainte normale à l'interface oxydée; k , la constante de Boltzmann; T , la température d'oxydation; Vd et V_k , les volumes d'activation de l'effet des contraintes respectivement sur la diffusivité et sur la constante de réaction à l'interface.

La pression hydrostatique dans l'oxyde est calculée selon l'équation (II.10), à partir des contraintes normales des directions x et y : σ_{xx} et σ_{yy} .

$$P = -\frac{1}{2}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \quad (\text{II.10})$$

$P > 0$ et $P < 0$ correspondent respectivement à des pressions compressive et tensile. A l'opposé $\sigma_{nn} > 0$ et $\sigma_{nn} < 0$ correspondent respectivement à des contraintes normales à l'interface tensiles et compressives. D'après Kao, sur un substrat convexe, l'oxyde croît en compression radiale et en tension tangentielle. Dans ce cas, seul le taux de réaction est réduit. $D_o^{(\sigma)}$ et $k_s^{(\sigma)}$ sont alors décrits par les équations (II.7) et (II.8). En revanche, sur un substrat concave, il croît en compression radiale et tangentielle. Ainsi, nous avons P et σ_{nn} qui sont compressives. La diffusion des oxydants dans l'oxyde est alors ralentie et la réaction à l'interface est réduite comme les équations (II.6) et (II.8) le décrivent.

Connaissant $D_o^{(\sigma)}$ et $k_s^{(\sigma)}$, la vitesse d'oxydation du silicium peut être prédite. Pour cela, on résoud une équation de Laplace définissant la diffusion des agents oxydants dans l'oxyde, en fonction de leur concentration $C(x, y)$ aux coordonnées (x, y) :

$$D_o^{(\sigma)} \cdot \Delta C(x, y) \simeq 0 \quad (\text{II.11})$$

La vitesse de déplacement de l'interface, ou la vitesse d'oxydation le long de l'interface Si/SiO_2 est alors déduite:

$$V_{(ox)}^{\vec{}} = \frac{k_s^{(\sigma)} C(x, y)}{N} \vec{n}(x, y) \quad (\text{II.12})$$

où $\vec{n}(x, y)$ est le vecteur normal à l'interface Si/SiO_2 . Comme ce sont les effets des contraintes mécaniques sur la diffusion et la constante de réaction qui vont réduire la vitesse d'oxydation, il faut pouvoir calculer ces contraintes.

II.1.2 Modèles rhéologiques - Calcul des contraintes

La seconde partie de la modélisation de l'oxydation du silicium consiste à résoudre les équations d'équilibre. Pour cela, les relations qui unissent contraintes et déformations doivent être étudiées. La croissance de l'oxyde déforme les matériaux adjacents: le Si_3N_4 et le Si , et induit des contraintes dans l'ensemble des matériaux.

Le comportement rhéologique du silicium, de l'oxyde de silicium et du nitrure de silicium est modélisé de la façon suivante [18]:

– le silicium est un matériau élastique, représenté par le modèle analogique du ressort (Figure II.1). Il suit la loi de Hooke. Celle-ci exprime le tenseur des contraintes comme une variation linéaire des déformations en fonction des modules de compressibilité et de rigidité (fonctions du module d'Young E et du coefficient de Poisson ν du silicium).

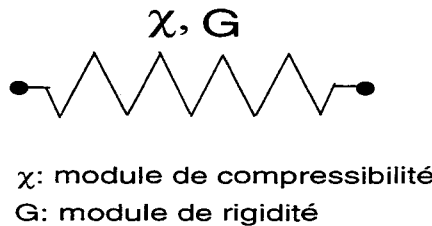


Figure II.1 – Modèle analogique de l'élasticité (cas du silicium). Le ressort est défini par les modules de compressibilité et de rigidité.

– le nitrure de silicium et l'oxyde de silicium sont des matériaux viscoélastiques non-linéaires, qui suivent la loi du liquide de Maxwell. Leur modèle analogue est celui du ressort associé en série à un piston (fig. II.2):

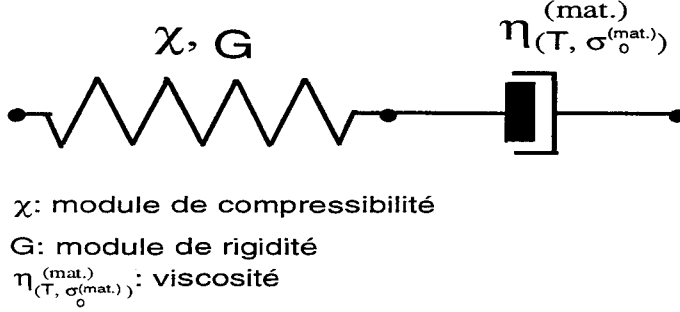


Figure II.2 – Modèle analogue de la viscoélasticité non-linéaire (cas du SiO_2 et du Si_3N_4). Le ressort est défini par les modules de compressibilité χ et de rigidité G , tandis que le piston est défini par la viscosité $\eta_{(T, \sigma_0^{(mat.)})}^{(mat.)}$.

Un matériau viscoélastique non-linéaire est un matériau qui peut à la fois subir des déformations élastiques réversibles et des déformations visqueuses non réversibles. Il subit une déformation instantanée lorsqu'il est soumis à une contrainte (c'est le "ressort" qui se déforme). Puis une relaxation des contraintes s'en suit, au cours du temps (c'est le "piston" qui absorbe cette déformation, le "ressort" se relâchant), selon la constante de temps τ caractéristique du matériau (mat.): $\tau = \eta_{(\sigma_0^{(mat.)})}^{(mat.)} / G$. On définit $\eta_{(\sigma_0^{(mat.)})}^{(mat.)}$ comme la viscosité du matériau et G comme le module de rigidité défini en fonction du module d'Young E et du coefficient de Poisson ν par: $G = E / (2(1 + \nu))$.

La viscosité de ce type de matériau est dépendante de la température et du niveau de contraintes dans le matériau. En effet, au delà d'un certain niveau de contraintes $\sigma_0^{(mat.)}$, la vitesse de déformation ne varie plus proportionnellement à la contrainte, mais elle varie plus vite [19]. Elle suit la modélisation de Eyring fluidifiante décrite par l'équation (II.13) [20]:

$$\eta_{(T, \sigma)}^{(mat.)} = \eta_{(T)}^{(mat.)} \frac{(\sigma_{max} / \sigma_0^{(mat.)})}{\sinh(\sigma_{max} / \sigma_0^{(mat.)})} \quad (II.13)$$

$$\text{et } \eta_{(T)}^{(mat.)} = \eta_0^{(mat.)} \exp\left(\frac{E_\mu^{(mat.)}}{kT}\right) \quad (II.14)$$

avec "mat." le matériau auquel la paramètre se rapporte ("ox" pour l'oxyde; "nit" pour le nitrure); $\eta_{(T)}^{(ox)} = \eta_0^{(ox)} \exp\left(\frac{E_\mu^{(ox)}}{kT}\right)$ et $\eta_{(T)}^{(nit)} = \eta_0^{(nit)} \exp\left(\frac{E_\mu^{(nit)}}{kT}\right)$,

les viscosités à faible niveau de contraintes respectivement pour les matériaux oxyde et nitrure; σ_{max} , la contrainte de cisaillement maximale; $E_{\mu}^{(ox)}$ et $E_{\mu}^{(nit)}$, les énergies nécessaires pour rompre une liaison, ou les barrières de potentiel à dépasser afin de permettre la déformation viscoélastique respectivement de l'oxyde et du nitrure; $\sigma_0^{(ox)}$ et $\sigma_0^{(nit)}$, les valeurs critiques du cisaillement, respectivement pour les matériaux oxyde et nitrure, au-delà desquelles le matériau perd son caractère linéaire.

Dans le cas des déformations planes, cas de la simulation, σ_{max} est exprimée par la formule de Mohr (équation (II.15)):

$$\sigma_{max} = \sqrt{\frac{(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2}{2} + \sigma_{xy}^2} \quad (\text{II.15})$$

où σ_{xx} et σ_{yy} sont les contraintes normales en x et en y, et σ_{xy} sont les contraintes de cisaillement en xy.

D'après la théorie de Eyring, $\sigma_0^{(mat.)}$ correspond au travail nécessaire que doivent fournir les contraintes de cisaillement pour rompre les molécules du matériau:

$$\sigma_0^{(mat.)} = \frac{2kT}{V_c^{(mat.)}} \quad (\text{II.16})$$

où k est la constante de Boltzmann ($8.614 \times 10^{-5} eV/K$); T est la température; $V_c^{(ox)}$ et $V_c^{(nit)}$ sont les volumes unitaires d'activation dans lesquels ont lieu les réarrangements atomiques sous contraintes, respectivement pour les matériaux oxyde et nitrure.

Plus la température est élevée, plus le seuil est bas. A faible température, alors le caractère élastique est largement prédominant.

Dans le cas d'un matériau viscoélastique, la matrice de rigidité va s'exprimer en fonction du module de compressibilité et de la viscosité des matériaux. Les viscosités sont difficilement mesurables à cause de la dépendance de nombreux facteurs (concentration de groupements hydroxils [OH] dans l'oxyde et des hydrogènes H dans le nitrure... [18]). Cependant, elles peuvent être déterminées par l'intermédiaire de simulations, comme ceci a été fait par Rafferty avec SUPREM-IV [22, 23]. Il a déduit les viscosité de l'oxyde et du nitrure, en fonction de la température, à partir de simulations de structures d'isolement LOCOS, et en s'aidant des expériences de Kao [5, 6].

En ce qui concerne le volume d'activation, Donnadiou [19] le définit comme le volume de la zone dans laquelle ont lieu les réarrangements sous contraintes. Si l'on suit son raisonnement, le volume d'activation de la viscosité de l'oxyde $V_c^{(ox)}$ devrait être un multiple entier du volume du tétraèdre du SiO_2 , c'est à dire un multiple de 45\AA .

Les équations décrivant la diffusion des espèces oxydantes au travers de l'oxyde et la déformation viscoélastique ou élastique des matériaux ont été implantées dans IMPACT-4, sous deux variantes dont nous décrivons succinctement les caractéristiques dans le paragraphe suivant.

II.1.3 L'approche d'IMPACT-4

IMPACT-4 propose deux schémas algorithmiques pour modéliser l'oxydation du silicium. Ils ont été élaborés et implantés par V. Senez et D. Collard.

Le modèle le plus général, dit complet, traite avec exactitude de:

- l'expansion de volume créée par la transformation de la couche de silicium en oxyde,
- l'action de cette expansion sur le matériau oxydé et les couches supérieures,
- la manière dont les différents matériaux s'opposent à la sollicitation que constitue cette expansion en volume.

Le calcul exact du champ de contraintes est effectué dans tous les matériaux de la structure.

Le second modèle, dit incomplet, est utilisé si on ne cherche à prédire que la topologie de la structure d'isolement. Dans ce cas, il n'est pas nécessaire de connaître les contraintes dans le substrat. Celui-ci est considéré comme un corps euclidien ou infiniment rigide. Il en résulte que:

- l'expansion de volume généré par le nouvel oxyde se traduit par une condition initiale de déplacement de l'interface Si/SiO_2 ,
- les effets de cette expansion sur la géométrie et le niveau de contraintes ne sont calculés que pour les matériaux oxyde et nitrure.

Les contraintes sont calculées en résolvant les relations d'équilibre provenant de la relation fondamentale de la dynamique.

Toutes les structures qui sont dans cette thèse ont été simulées avec le modèle complet, afin de toujours avoir accès aux valeurs de contraintes dans tous les matériaux. La Figure II.3 donne les schémas algorithmiques des deux modèles "complet" et "incomplet" [24].

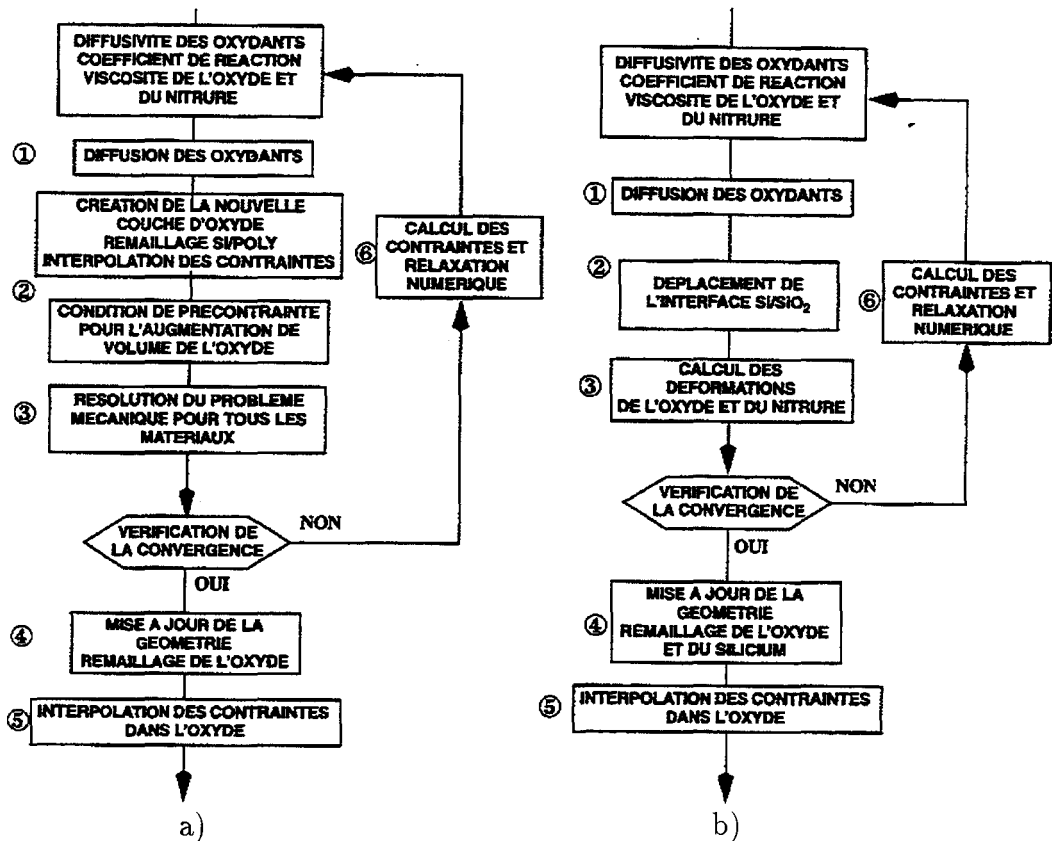


Figure II.3 – Algorithmes des modèles d'oxydation implantés dans IMPACT-4: a) modèle complet; b) modèle incomplet.

Les modèles d'oxydation du silicium introduit dans IMPACT-4 possèdent six paramètres dont les valeurs ne sont pas accessibles expérimentalement, mais qui le sont avec l'aide des simulations. Ces paramètres sont: V_k , V_d , $V_c^{(ox)}$, $\eta_{(T)}^{(ox)}$, $V_c^{(nit)}$, $\eta_{(T)}^{(nit)}$. Ce sont ces paramètres que nous souhaitons calibrer afin de simuler de manière prédictive les différentes structures d'isolement utilisées dans les technologies développées par STMicroelectronics.

II.2 Première calibration

Cette partie décrit tout d'abord la méthode utilisée pour la première calibration: la RSM (Response Surface Methodology ou Technique de Régression

Statistique en français). On rappelle ensuite brièvement les résultats de travaux précédents pour situer le contexte de l'étude. Enfin, les paramètres relatifs au nitrure et à l'oxyde sont calibrés de manière indépendante en s'aidant de la méthode RSM pour des structures de type LOCOS de pitch 2 μm .

II.2.1 Méthode de calibration: RSM ou EMB

La RSM (Response Surface Methodology ou Technique de Régression Statistique en français) est aussi connue sous le nom de EMB (Empirical Model Building ou Construction de Modèles Empiriques en français). Ces acronymes sont très populaires dans le monde de l'industrie. Ils indiquent un ensemble d'instruments mathématiques développés pour garder sous contrôle les appareils ou les procédés de fabrication, lorsque le manque de connaissances physiques adaptées, ou leur complexité ne permettent pas l'utilisation de modèles exacts. Dans ce cas, l'approche consiste à construire des modèles empiriques, ou encore des fonctions analytiques (en général des polynômes), non dérivées de lois physiques ou de premiers principes, mais capables de reproduire, avec des conditions restreintes de validité, le comportement des réponses qui sont analysées.

Dans les dernières années, cet ensemble d'outils mathématiques a vu son domaine d'applications s'étendre aux outils CAD et TCAD dans un but d'optimisation et de statistique. Considérant la variable de sortie de l'expérience comme le résultat de la simulation, il est alors possible d'obtenir un modèle empirique de la même manière que pour les expériences pratiques.

La méthode RSM est toute indiquée dans notre cas: nous cherchons à **optimiser** des **facteurs** ou **paramètres d'entrée** d'un programme de simulation qui n'ont pas de liens entre eux [25]. Les **réponses**, ou **paramètres de sortie**, sont données par les simulations. Celles-ci sont les paramètres géométriques caractéristiques des structures simulées. La méthode proposée par ces instruments mathématiques consiste à projeter une série d'expériences (cad. réaliser un **plan d'expérience**) attribuant aux variables d'entrée (**facteurs**) des valeurs selon un schéma précis et collectant les grandeurs de sortie (**réponses**) de chaque expérience [26]. L'utilisabilité de cette projection, ou plan d'expérience, dépend fondamentalement du choix des intervalles à l'intérieur desquels les facteurs vont varier, et de la répartition des expériences à l'intérieur de l'espace défini par ces intervalles. Il faut que d'une part les intervalles ne s'étendent pas à des valeurs trop éloignées de celles utilisées dans la réalité: par exemple l'intervalle de température d'oxydation [500°C-1100°C] est inapproprié, dans notre cas, puisque aucune oxydation de silicium n'est ef-

fectuée à une température aussi basse que 500°C. D'autre part, il faut que la densité d'expériences comprises dans l'espace défini par les intervalles des facteurs soit uniforme et suffisamment grande, afin d'éviter d'avoir une trop grande partie de l'espace laissée inexplorée. Le choix d'intervalles judicieux est nécessaire pour poursuivre avec succès les étapes successives. Ils sont fixés soit à l'aide de résultats issus de travaux expérimentaux ou de calibrations faites auparavant, soit en faisant un travail préliminaire sur la variabilité des réponses considérées en fonction des valeurs des facteurs.

Avec les expériences créées et les réponses obtenues, des polynômes (**macromodèles**) sont construits en fonction des facteurs, en utilisant une méthode de **régression** [27]. Puis des indices, indiquant l'accord entre les macromodèles et les réponses obtenues, appelés **coefficients de corrélation**, sont calculés. Ils sont considérés bons s'ils sont proches de 1 ou du moins supérieurs à 0.90.

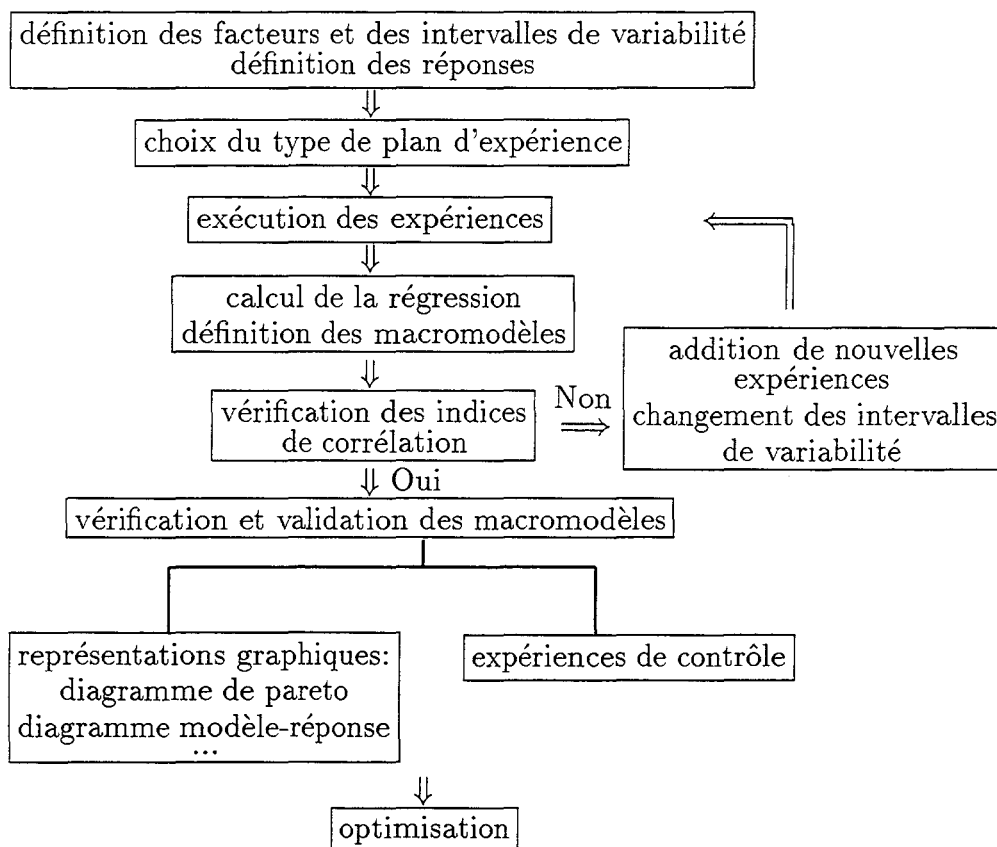


Figure II.4 – Approche de la construction des modèles empiriques (EMB), d'après Ulysses [7].

Dans le cas où les coefficients de corrélation sont mauvais, ou si l'on souhaite simplement augmenter la précision du polynôme interpolé, on peut agir de deux manières différentes: i) en variant les intervalles de variabilité des facteurs en entrée (en les réduisant si on estime que les réponses sont trop dispersées dans ces intervalles), ii) en ajoutant des expériences ultérieures. L'influence des paramètres les uns sur les autres est analysée à l'aide de **diagrammes de pareto**. On vérifie que le macromodèle est satisfaisant, en procédant à sa validation au travers de représentations graphiques des relations contenues dans les macromodèles confrontées aux valeurs des réponses (**diagrammes model-réponse**) [7].

Nous avons utilisé un environnement, nommé Ulysses [7], qui est un ensemble de programmes dédiés à l'application de la RSM aux simulations de procédé de fabrication. Il permet de créer des plans d'expériences, de calculer des régressions, de réaliser des analyses statistiques et de procéder à des optimisations. Des représentations graphiques des résultats peuvent aussi être obtenues. La Figure II.4 décrit le schéma de l'approche de l'EMB par Ulysses.

Dans la section suivante, on décrit le contexte de la première calibration.

II.2.2 Contexte de la première calibration

L'utilisation de modèles physiques décrivant un phénomène physico-chimique nécessite au préalable la calibration des paramètres non mesurables de ces modèles. Cette calibration s'effectue par confrontation entre les résultats de la simulation et ceux des données expérimentales. Cependant, une calibration n'est pas universelle. Les valeurs trouvées, non directement mesurables (comme la viscosité, les volumes d'activation...) vont dépendre de la précision des modèles physiques employés, et de la technologie utilisée pour préparer les données expérimentales. Ce sont les raisons pour lesquelles différents résultats de calibration peuvent être obtenus, selon les programmes de simulation, etc... Pourtant, il est important, et c'est le but de ce chapitre, de rechercher des valeurs de paramètres qui permettent d'avoir un programme de simulation prédictif pour une large gamme de structures d'isolement.

Différentes méthodes peuvent être utilisées pour arriver au même but: la calibration de paramètres pour des structures et une technologie données. Deux méthodes, ayant permis la réalisation et la calibration initiale des programmes IMPACT-4 et SUPREM-IV, ont été reportés dans des travaux faits précédemment. Ils vont maintenant être décrites [3, 32, 30]. Nous nous sommes aidés de ces calibrations pour définir les intervalles de chaque facteur.

a) La calibration dans SUPREM-IV

Un des premiers programmes de simulation de technologie disponible à STMicroelectronics est SUPREM-IV, développé à l'Université de Stanford [32]. Ce programme résout les équations de Laplace et de Navier-Stokes pour décrire le problème de l'oxydation. Dans ce programme, le nitrure est considéré comme un matériau visqueux ($Vc^{(nit)} = 0$).

Pour calibrer ce programme, dix structures d'isolement de type LOCOS ont été fabriquées afin de servir de référence aux résultats des simulations. Les échantillons ont été réalisés dans la ligne pilote de la division Recherche et Développement de STMicroelectronics, dans le site d'Agrate (Italie). La fabrication consiste en une oxydation thermique humide, réalisée à pression atmosphérique à trois températures différentes et pour quatre épaisseurs de nitrure de silicium. La largeur du pitch et du nitrure sont respectivement de $2 \mu m$ et $1 \mu m$. Les caractéristiques technologiques sont données dans le tableau II.1.

Temp. d'oxydation	Epaisseur du piédestal	Epaisseur du nitrure	n°
920°C	$150 \pm 15 \text{Å}$	$900 \pm 90 \text{Å}$	1
	$150 \pm 15 \text{Å}$	$1300 \pm 90 \text{Å}$	2
	$150 \pm 15 \text{Å}$	$1600 \pm 90 \text{Å}$	3
	$150 \pm 15 \text{Å}$	$2000 \pm 90 \text{Å}$	4
1000°C	$150 \pm 15 \text{Å}$	$900 \pm 90 \text{Å}$	5
	$150 \pm 15 \text{Å}$	$2000 \pm 90 \text{Å}$	6
1100°C	$150 \pm 15 \text{Å}$	$900 \pm 90 \text{Å}$	7
	$150 \pm 15 \text{Å}$	$1300 \pm 90 \text{Å}$	8
	$150 \pm 15 \text{Å}$	$1600 \pm 90 \text{Å}$	9
	$150 \pm 15 \text{Å}$	$2000 \pm 90 \text{Å}$	10

Tableau II.1 – Caractéristiques des structures LOCOS fabriquées pour la calibration de SUPREM-IV. Dans chaque cas, le pitch est égal à $2 \mu m$, et la largeur de nitrure vaut $1 \mu m$.

Des analyses soignées ont été réalisées avec un microscope électronique à haut balayage, dans les laboratoires du LETI à Grenoble. Les profils ainsi obtenus sont confrontés aux simulations. Seuls les paramètres relatifs à la viscosité de l'oxyde et du nitrure: $Vc^{(ox)}$, $\eta_{(T)}^{(ox)}$, $\eta_{(T)}^{(nit)}$ ont été calibrés par Gianpietro Carnevale dans son travail de "tesi" [30]. D'autre part, il a conservé les valeurs de Vk (15Å^3) et Vd (75Å^3) égales à celles implantées par défaut dans SUPREM-IV, car elles sont issues des travaux de calibration de Kao [5, 6]. Le résultat de cette calibration est donné dans le tableau II.2.

Tableau des valeurs obtenues par calibration						
Temp °C	Vk (Å ³)	Vd (Å ³)	Vc ^(ox) (Å ³)	$\eta_{(T)}^{(ox)}$ (Poises) $1.2 \cdot 10^5 \exp \frac{2.3eV}{kT}$	$\eta_{(T)}^{(nit)}$ (Poises)	
800	15	75	300			
900			390			
920			397	$72 \cdot 10^{13}$	900 Å	$22.5 \cdot 10^{13}$
					1300 Å	$100 \cdot 10^{13}$
					1600 Å	$500 \cdot 10^{13}$
					2000 Å	$700 \cdot 10^{13}$
1000			425	$20 \cdot 10^{13}$	900 Å	$80 \cdot 10^{13}$
					2000 Å	$500 \cdot 10^{13}$
1100			1000	$4 \cdot 10^{13}$	900 Å	$12 \cdot 10^{13}$
					1300 Å	$15 \cdot 10^{13}$
	1600 Å	$30 \cdot 10^{13}$				
	2000 Å	$40 \cdot 10^{13}$				

Tableau II.2 – Tableau récapitulatif des valeurs calibrées des paramètres pour SUPREM-IV. La signification de chaque paramètre est donnée à nouveau pour mémoire ci-dessous.

La légende utilisée dans le tableau II.2 est la suivante:

- Vk, Vd volumes d'activation de l'effet des contraintes, respectivement, sur la constante de réaction et le coefficient de diffusion
- Vc^(ox) volume d'activation de l'effet des contraintes sur la viscosité de l'oxyde
- $\eta_{(T)}^{(ox)}, \eta_{(T)}^{(nit)}$ viscosités, respectivement, de l'oxyde et du nitrure

Nous pouvons noter deux choses:

- la dépendance de la viscosité du nitrure avec l'épaisseur de celui-ci. Elle peut s'expliquer par le modèle rhéologique du nitrure utilisé dans SUPREM-IV qui considère qu'il est de type visqueux. Cela rend la viscosité indépendante des contraintes issues de la déformation du nitrure par la croissance de l'oxyde. L'expérience montre que ce n'est pas le cas et qu'un modèle non-linéaire est plus adapté.
- la viscosité de l'oxyde suit une loi d'Arrhénius ayant une énergie d'activation $E_a = 2.3eV$

b) La calibration dans IMPACT-4

La calibration des paramètres implantés dans IMPACT-4 a été faite par Vincent Senez au cours de sa thèse de Doctorat préparée à l'Institut Supé-

rieur d'Electronique du Nord (Lille, France) [24]. Ici, le modèle rhéologique utilisé pour le nitrure est de type viscoélastique non-linéaire. Donc $Vc^{(nit)}$ est non nul. V. Senez a choisi de calibrer l'ensemble des paramètres relatifs à l'oxydation bi-dimensionnelle. Ce sont les six paramètres décrits dans le tableau II.3.

Paramètres	Signification
$\eta_{(T)}^{(ox)}$	Viscosité de l'oxyde (Poises)
$Vc^{(ox)}$	Volume d'activation des contraintes sur la plasticité de l'oxyde (\AA^3)
$\eta_{(T)}^{(nit)}$	Viscosité du nitrure (Poises)
$Vc^{(nit)}$	Volume d'activation des contraintes sur la plasticité du nitrure (\AA^3)
Vk	Volume d'activation des contraintes sur le coefficient de réaction (\AA^3)
Vd	Volume d'activation des contraintes sur la diffusivité des oxydants (\AA^3)

Tableau II.3 – Définition des paramètres calibrés par V. Senez [24].

La caractéristique principale de ce travail de calibration est l'utilisation d'une méthode par itération. Elle a été réalisée à l'aide des structures cylindriques convexes et concaves de Kao [5] et sur des structures d'isolement de type LOCOS enterré, subissant une oxydation humide, à pression atmosphérique, à des températures allant de 800°C à 1100°C. La calibration s'effectue en deux temps. On détermine tout d'abord les propriétés visqueuses ($\eta_{(T)}^{(ox)}$, $Vc^{(ox)}$) de l'oxyde, ainsi que les volumes d'activation Vd et Vk . Puis les paramètres du nitrure sont définis indépendamment. La calibration de ces paramètres a donné les valeurs reportées dans le tableau II.4.

Température (°C)	Vd (\AA^3)	Vk (\AA^3)	$\eta_{(T)}^{(ox)}$ (Poises)	$Vc^{(ox)}$ (\AA^3)	$\eta_{(T)}^{(nit)}$ (Poises)	$Vc^{(nit)}$ (\AA^3)
800	75	15	$9 \cdot 10^{15}$	300	$6 \cdot 10^{16}$	120
900			$6 \cdot 10^{15}$	390	$3 \cdot 10^{16}$	130
1000			$2 \cdot 10^{14}$	425	$5 \cdot 10^{15}$	170
1100			$4 \cdot 10^{13}$	1000	$1 \cdot 10^{15}$	350

Tableau II.4 – Calibration des paramètres relatifs à l'oxydation 2D du silicium, par V. Senez [24], pour IMPACT-4.

Nous avons les mêmes valeurs pour Vd , Vk et $Vc^{(ox)}$ que pour la calibration de G. Carnevale (tableau II.2). En revanche, $\eta_{(T)}^{(ox)}$, $\eta_{(T)}^{(nit)}$, et $Vc^{(nit)}$ sont

différents. Ceci est à attribuer au modèle la viscoélastique non linéaire appliqué au nitrure. L'indépendance de la viscosité du nitrure de son épaisseur prouve que ce modèle est plus précis que le modèle visqueux adopté dans SUPREM-IV.

Cependant, en utilisant ces derniers paramètres pour simuler les structures LOCOS spécialement fabriquées (tableau II.1), le résultat n'est pas en accord avec les photos SEM: i) le nitrure se plie trop, réduisant ainsi la largeur de la zone active, car l'oxydation sous les bords du nitrure est trop importante; ii) le perçage observé pour certaines structures est plus faible qu'en réalité. Ces désaccords peuvent être expliqués par la différence de technologies, de conditions expérimentales entre les échantillons utilisés à l'ISEN et ceux fabriqués par STMicroelectronics, provoquant des différences de caractéristiques physiques des matériaux.

Une nouvelle calibration est donc nécessaire, afin d'avoir des paramètres en accord avec la technologie et les conditions expérimentales de ST-Microelectronics.

c) Nouvelle calibration: facteurs, intervalles, réponses

i) **Facteurs de la calibration:** Nous avons utilisé la méthode RSM pour effectuer la calibration des paramètres: $\eta_{(T)}^{(ox)}$, $\eta_{(T)}^{(nit)}$, $V_c^{(ox)}$ et $V_c^{(nit)}$. N'ayant pas de raisons pour les modifier, les valeurs de Vd et Vk sont maintenues identiques à celles calibrées par Kao, et sont celles implantées par défaut dans SUPREM-IV et IMPACT-4.

Dans les calibrations décrites dans les paragraphes II.2.2 a) et II.2.2 b), $V_c^{(ox)}$ et $V_c^{(nit)}$ sont dépendants de la température. Or n'ayant trouvé aucune justification à cette dépendance nous avons souhaité les calibrer de manière à ce qu'ils soient indépendants de la température.

Les viscosités à faibles niveaux de contraintes $\eta_{(T)}^{(ox)}$ et $\eta_{(T)}^{(nit)}$, sont thermiquement activées (équation (II.14)). Afin de nous affranchir de la température, nous avons décidé de calibrer le logarithme du terme pré-exponentiel ($\log(\eta_0^{(mat.)})$) et le terme d'énergie d'activation ($E_\mu^{(mat.)}$). Nous avons donc calibré les paramètres du tableau II.5.

ii) **Choix des intervalles:** Il a été expliqué dans le paragraphe II.2.1 que le choix d'intervalles judicieux était très important pour le travail que nous désirons effectuer. Ceux que nous avons fixés sont issus d'un travail préliminaire, où nous avons cherché, en modifiant les valeurs des paramètres du tableau II.4, à nous rapprocher par simulation de la réalité. Nous sommes

donc partis des valeurs par défaut de IMPACT-4. Les intervalles ainsi déterminés sont dans le tableau II.5.

Paramètre	Nom utilisé pour la calibration/ intervalle	Définition
$V_c^{(nit)}$	VCNIT: [0; 400]	Volume d'activation des contraintes sur la plasticité du nitrure (\AA^3)
$\eta_{(T)}^{(nit)}$ = $\eta_0^{(nit)} \exp\left(\frac{E_\mu^{(nit)}}{kT}\right)$	VIN0= $\log(\eta_0^{(nit)})$: [4.2; 5.2] VINE= $E_\mu^{(nit)}$ [2.65; 3.25]	Logarithme du terme pré-exponentiel de la viscosité à faible niveau de contraintes $\eta_{(T)}^{(nit)}$ Energie d'activation de la viscosité à faible niveau de contraintes $\eta_{(T)}^{(nit)}$
$V_c^{(ox)}$	VCOX [200; 1000]	Volume d'activation des contraintes sur la plasticité de l'oxyde (\AA^3)
$\eta_{(T)}^{(ox)}$ = $\eta_0^{(ox)} \exp\left(\frac{E_\mu^{(ox)}}{kT}\right)$	VIO0= $\log(\eta_0^{(ox)})$ [4; 6] VIOE= $E_\mu^{(ox)}$ [2.05; 2.75]	Logarithme du terme pré-exponentiel de la viscosité à faible niveau de contraintes $\eta_{(T)}^{(ox)}$ Energie d'activation de la viscosité à faible niveau de contraintes $\eta_{(T)}^{(ox)}$

Tableau II.5 – Tableau récapitulatif des paramètres calibrés et de leurs intervalles.

iii) **Définition des réponses:** Les réponses extraites des simulations sont les épaisseurs d'oxyde "fox", "edgnit" et "padox", situées aux trois abscisses indiquées sur la Figure II.5.

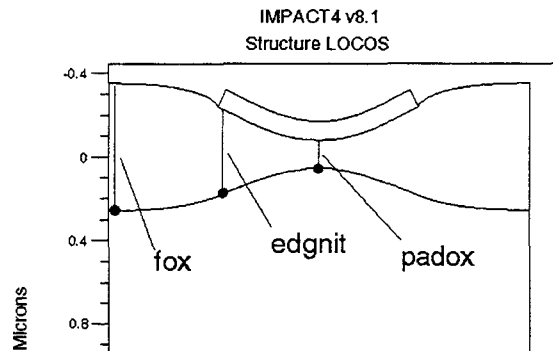


Figure II.5 – Simulation d'une structure LOCOS. Les trois épaisseurs d'oxyde extraites qui tiennent lieu de réponses au plan d'expérience sont indiquées sur la figure: "fox", "edgnit", "padox".

Nous avons choisi de faire la calibration en deux temps: i) calibration des paramètres relatifs au nitrure; ii) calibration des paramètres relatifs à l'oxyde. Nous ne traitons alors que trois facteurs à la fois, au lieu de six: le nombre de combinaisons possibles entre les valeurs des facteurs (c'est à dire le nombre d'expériences) est alors plus faible, et les réponses étant moins nombreuses, il est plus facile de les manipuler.

II.2.3 Première partie de la calibration: les paramètres relatifs au nitrure.

a) Le plan d'expérience

Le choix des valeurs des variables d'entrée dans l'espace défini par leurs intervalles est une étape cruciale dans la RSM, pour le plan d'expérience. Il dépend du modèle choisi, du nombre de simulations désiré et du degré de confiance à atteindre. Les combinaisons entre les variables d'entrée sont choisies de manière à ce que: i) elles couvrent l'ensemble de l'espace choisi; ii) le nombre des valeurs choisies soit peu élevé.

Dans Ulysses, le plan d'expérience se forme à partir des n variables d'entrée normalisées. "Normalisées" signifie qu'elles varient entre $[-1; +1]$. Sur les Figures II.6 a) et b) sont schématisés deux exemples de plans d'expérience les plus simples qui permettent une répartition des valeurs dans tout l'espace et qui minimisent le nombre de simulations. Si nous avons $n=3$ variables d'entrée (x_1, x_2, x_3), les combinaisons choisies peuvent être CFD (Plan Factoriel Complet) ou CCF (Plan Central et Faces Centrées). Dans le premier cas, les x_i ne prennent que les valeurs 1 ou -1. Dans le second cas, elles ne prennent que les valeurs 1, 0 ou -1 (Figure II.6).

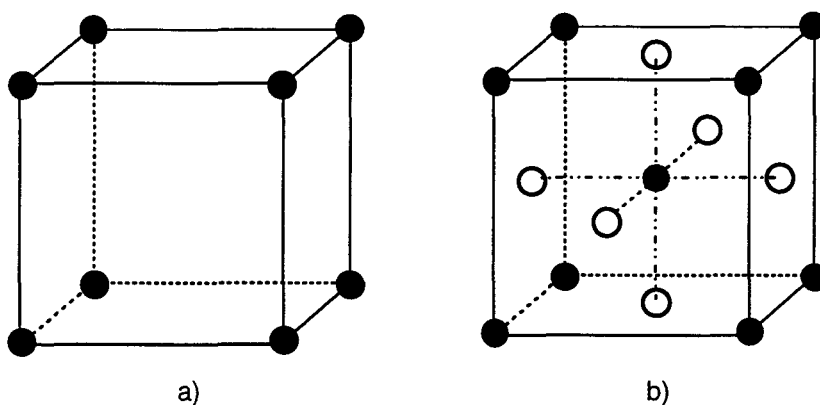


Figure II.6 – Modèles: a) CFD (Plan Factoriel Complet), et b) CCF (Plan Central et Faces Centrées) pour des plans d'expérience ayant trois facteurs d'entrée.

Cependant, si l'on désire utiliser un modèle plus complexe, permettant de répartir les expériences plus uniformément dans l'espace, une répartition aléatoire des valeurs peut être utilisée, à partir d'un nombre de simulations que l'on fixe [31]. Un de ces modèles est l'"Echantillonnage Hypercube Latin" [32]. Son avantage est de générer chaque expérience (chaque point) de façon à ce qu'il appartienne à une ligne et une colonne différente. La Figure II.7 présente un exemple pour deux variables A et B, et pour quatre simulations.

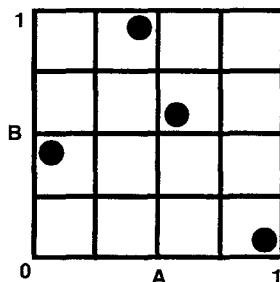


Figure II.7 – Modèle d'Echantillonnage Hypercube Latin pour un plan d'expérience ayant deux facteurs d'entrée.

Un premier plan d'expérience de type CCF a été réalisé. Mais, les macromodèles obtenus étaient en mauvais accord avec les réponses du plan: les coefficients de régression étaient bien inférieurs à 0.90. Nous avons alors pris le modèle d'Echantillonnage Hypercube Latin, plus complexe, en choisissant 15 combinaisons des x_i (ou 15 **expériences**).

b) Exécution des expériences

Les quinze simulations ont été lancées pour chacune des dix structures. Les trois réponses définies à la Figure II.5 sont extraites des 15×10 simulations. Nous recueillons donc au total 150 fichiers-réponses.

c) La régression

L'analyse des 150 simulations impliquerait la régression et l'optimisation de 10×3 macromodèles (un macromodèle pour chaque structure et chaque type de réponse), ce qui est beaucoup trop. Nous avons donc cherché à rassembler les réponses recueillies à partir des 10 structures, pour chaque jeu de paramètres. Ainsi, nous avons réduit les $10 \times 15 \times$ réponses à seulement 15×3 réponses.

Pour cela, il suffit de faire les opérations suivantes pour les 15 jeux de paramètres:

- Pour chaque réponse (fox, padox ou edgnit), et chacune des 15 simulations, calculer la différence entre l'épaisseur d'oxyde obtenue expé-

rimentalement et celle donnée par la simulation. On obtient: diff-fox, diff-padox, diff-edgnit.

- Pour chacune des 15 expériences, calculer la somme des valeurs absolues des réponses différentielles (diff-fox, diff-padox, diff-edgnit), sur l'ensemble des 10 structures définies au tableau II.1. Idéalement, ces sommes doivent être nulles.

La régression que calcule Ulysses permet d'exprimer les réponses $y(\vec{x})$ en fonction des variables d'entrée x_i . Deux modèles de régression existent: i) le modèle linéaire, ii) le modèle quadratique. L'équation (II.17) présente la forme générale du macromodèle quadratique. Dans le cas de trois facteurs, et pour un modèle quadratique dix coefficients sont calculés.

$$y(\vec{x}) = a_{0,0} + \sum_{i=1}^n a_i x_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j \quad (\text{II.17})$$

où $a_{i,j}$ sont des coefficients constants.

d) Les macromodèles

Il a tout d'abord été réalisé par régression le calcul d'un macromodèle linéaire, pour chaque réponse. Mais il ne reproduisait pas suffisamment bien les réponses. Le macromodèle quadratique est alors calculé par régression. Les coefficients sont donnés dans le tableau II.6. Les indices des facteurs sont attribuées ainsi: $x_1 = VIN0$, $x_2 = VINE$ et $x_3 = VCNIT$.

Indice i,j	Coefficients $a_{i,j}$ du modèle de la réponse:		
	diff-fox	diff-padox	diff-edgnit
0. 0	0.80197	1.0524	0.77371
1. 0	-2.04106E-02	7.05152E-02	-2.04150E-02
2. 0	-3.78621E-02	5.71182E-03	-0.12436
3. 0	1.32746E-02	-5.07911E-04	7.19878E-02
1. 2	-6.86976E-02	0.57667	0.22412
1. 3	-5.85894E-02	0.40306	0.10782
2. 3	-2.11640E-02	4.18059E-02	-5.57514E-02
1. 1	-2.06690E-02	0.16851	8.19901E-02
2. 2	-1.59079E-02	0.26246	0.13693
3. 3	5.13095E-03	-2.99330E-03	-2.38554E-03

Tableau II.6 – Coefficients $a_{i,j}$ des macromodèles des réponses “diff-fox”, “diff-padox” et “diff-edgnit” pour la calibration des paramètres du nitrure.

e) Indices de corrélation

Trois indicateurs donnant la précision de l'équation de régression (ou macromodèle) peuvent ensuite être calculés:

- le coefficient de régression R^2 est un paramètre statistique qui mesure la capacité de prédiction du modèle. Il calcule la proportion de variation totale du modèle de régression par rapport aux réponses. Sa valeur varie de 0 à 1. Il est exprimé comme un pourcentage: il représente la proportion des valeurs qui peuvent être prévues par le modèle [26].
- le coefficient de régression ajusté R_a^2 permet de tenir aussi compte de la réduction de l'erreur résiduelle ϵ et de la simplicité du modèle [27]. Une valeur élevée de R^2 n'indique pas obligatoirement que le modèle choisi est bon. En effet, si R^2 et R_a^2 diffèrent complètement, alors il y a une bonne chance pour que le modèle ne soit pas si bon.
- le coefficient de régression de prédiction R_{pr}^2 permet de mesurer la pouvoir prédictif du modèle de régression [33].

Ces trois indicateurs sont tels que $R^2 > R_a^2 > R_{pr}^2$. Ils doivent être les plus proches possible de 1 pour que le modèle soit considéré comme bon [7]. Ici, nous avons obtenu:

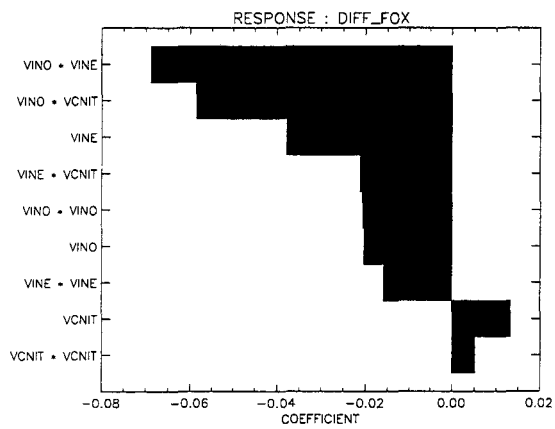
Réponse "y"	R^2	R_a^2	R_{pr}^2
diff-fox	0.95	0.86	0.63
diff-padox	0.93	0.82	0.53
diff-edgnit	0.97	0.87	0.75

Tableau II.7 – Valeurs des trois coefficients de régression calculés pour les trois réponses.

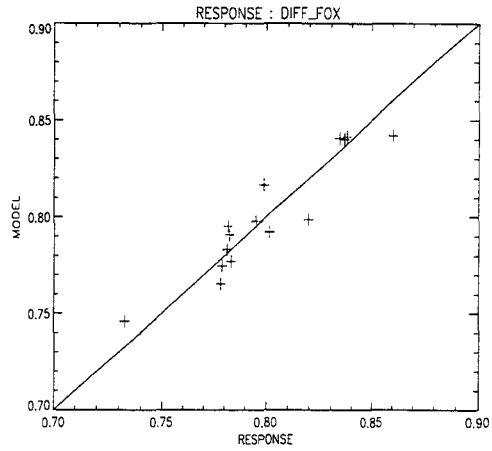
Ce sont des valeurs qui montrent que le modèle a un pouvoir prédictif moyen, car R_{pr}^2 n'est pas très élevé. Cependant, R^2 étant plutôt bon, car il est supérieur à 0.90, nous avons décidé qu'il n'était pas nécessaire de changer d'intervalles ou d'ajouter de nouvelles expériences dans le plan d'expérience.

f) Vérification et validation

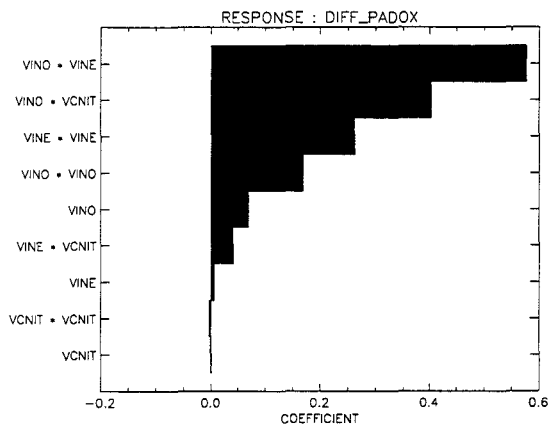
Une vérification graphique des macromodèles a été effectuée et est présentée sur la Figure II.8. Les diagrammes de pareto (graphes a), c) et e)) présentent les valeurs des coefficients de chaque facteur ou combinaisons de facteurs. Ils présentent les facteurs les plus influants sur les réponses et dans quel sens ils agissent.



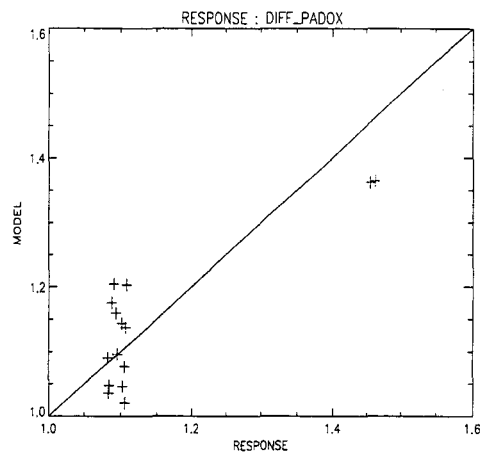
a)



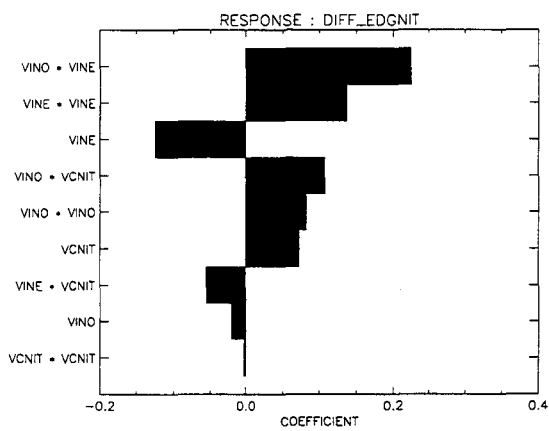
b)



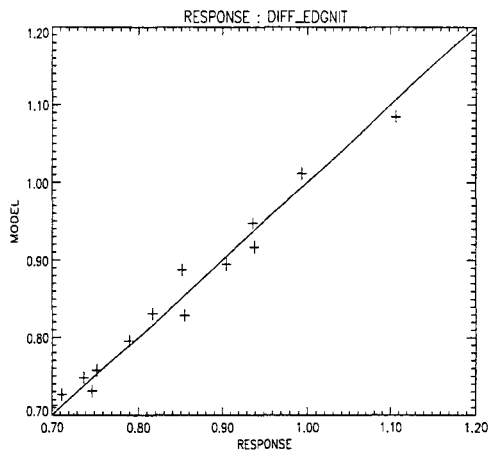
c)



d)



e)



f)

Figure II.8 – Calibration des paramètres du nitrure. a), c) et e) sont respectivement les diagrammes de pareto de diff-fox, diff-padox et diff-edgnit. b), d) et f) sont les confrontations entre les macromodèles calculés et les réponses correspondantes, pour chaque jeu de paramètres.

Les graphes b), d) et f) doivent être lus de la façon suivante, pour chaque réponse y :

- l'abscisse "RESPONSE" donne les valeurs de la réponse "y" obtenues à partir des simulations. C'est pourquoi, quinze points sont représentés sur les graphes: un pour chaque combinaison de facteurs.
- l'ordonnée "MODEL" donne les valeurs de la réponse "y" calculées à l'aide du macromodèle.

Ainsi, à chaque point représenté est associée une expérience qui fournit par la simulation la valeur de "RESPONSE" (l'abscisse) et par le macromodèle la valeur de "MODEL" (l'ordonnée). Dans le cas idéal, "MODEL"="RESPONSE": c'est la droite tracée. Ces graphes indiquent la précision avec laquelle le modèle prédit les réponses données par simulation.

Les observations que l'on peut faire sur les diagrammes de pareto sont les suivantes:

- Les coefficients de "diff-fox" sont environ un ordre de grandeur plus faibles que ceux de "diff-padox" et "diff-edgnit": les trois paramètres calibrés, correspondant aux caractéristiques physiques du nitrure, ont une influence moins importante sur "diff-fox".

- Ce sont les facteurs combinés, et notamment "VIN0*VINE", qui ont une majeure influence sur les réponses. C'est à dire que les paramètres sont fortement corrélés entre eux.

- L'énergie d'activation de la viscosité "VINE" a plus d'influence sur "diff-edgnit" que sur les autres réponses. Donc, c'est la calibration de ce facteur qui déterminera la manière dont le nitrure se déformera en fonction de la température.

- VCNIT est le facteur ayant le moins d'influence sur les réponses, sauf lorsqu'il est combiné avec "VIN0". Ceci peut être une preuve de la nécessité d'utiliser la dépendance de la viscosité avec les contraintes, selon la formule de Eyring (équation (II.13)).

- On remarque aussi que les coefficients de "diff-fox" ont un signe opposé à ceux de "diff-padox": les facteurs ou leurs combinaisons faisant croître "diff-padox" font en revanche décroître "diff-fox".

En ce qui concerne les confrontations des réponses simulées avec celles modélisées, la dispersion des points par rapport à la droite idéale est plutôt faible pour "diff-fox" et "diff-edgnit", montrant que le macromodèle est prédictif. Ceci n'est pas le cas de "diff-padox" où les points sont pratiquement tous situés à une abscisse "RESPONSE=1.1". L'explication est la suivante:

- Si la viscosité du nitrure est élevée, il ne peut y avoir perçage du piédestal, car le nitrure est trop rigide pour pouvoir se plier et favoriser l'oxydation

dessous. Le piédestal conserve alors son épaisseur nominale, constante: 0.02 μm , jusqu'à ce que la viscosité soit suffisamment faible pour permettre le perçage.

- La réponse "diff-padox" reproduit le comportement du piédestal: c'est à dire qu'elle est tout d'abord constante puis croissante lorsque la viscosité diminue. Or un macromodèle quadratique, de par la forme de sa courbe ne peut modéliser parfaitement cette évolution.

- La dispersion des points du graphe II.8 d), situés à "RESPONSE=1.1", est due à un accord non parfait du macromodèle avec les résultats de la simulation pour lesquels "diff-padox" est constante, tandis que le macromodèle ne l'est pas.

Nous observons cependant un relativement bon accord graphique entre les macromodèles et les réponses: nous pouvons donc nous servir de ces premiers pour effectuer l'optimisation des facteurs.

g) L'optimisation

Au cours de l'optimisation, on ne se sert que des macromodèles, car ils sont créés de façon à prédire avec une précision suffisante les résultats des simulations. Il peuvent donc remplacer les simulations, dans un espace de facteurs donné.

Le but d'une optimisation est de trouver les valeurs des facteurs pour lesquelles le résultat du macromodèle avoisine au mieux une valeur définie comme objectif. Cette valeur-objectif est en général la valeur de la mesure expérimentale. Dans notre cas, c'est la valeur pour laquelle les macromodèles (diff-fox, diff-padox, diff-edgnit), sont les plus proches possibles de "0", puisque les écarts entre simulations et mesures doivent être les plus petits possibles.

Ulysses propose deux méthodes différentes. La méthode *Quadprog* recherche les minimums en suivant les directions des pentes négatives maximum. La méthode *Monte carlo* génère N points au hasard dans l'espace de variabilité des facteurs. Parmi ceux-ci, Ulysses considère les premiers n points donnant des valeurs des macromodèles s'approchant le plus de leur valeur-objectif. Puis une technique d'optimisation est adoptée consistant à prendre comme départ chacun de ces n points et à les déplacer selon d directions. Le point "optimum" relevé est celui pour lequel les résultats des macromodèles sont les moins éloignés de leur valeur-objectif.

Nous avons utilisé ces deux méthodes qui donnent des résultats conver-

gents. Les valeurs optimisées sont les suivantes:

VIN0 (Poises)	VINE (eV)	VCNIT (Å ³)
4.75	3.06	200

Tableau II.8 – Valeurs calibrées des paramètres du nitrure.

Nous pouvons alors écrire la viscosité du nitrure, en fonction de la température:

$$\eta_{(T)}^{(nit)} = 10^{4.75} \exp\left(\frac{3.06}{kT}\right) = 5.62 \cdot 10^4 \exp\left(\frac{3.06}{kT}\right) \quad (\text{Poises}) \quad (\text{II.18})$$

Nous allons maintenant effectuer la calibration des paramètres de l'oxyde.

II.2.4 Deuxième partie de la calibration: paramètres relatifs à l'oxyde

a) Le plan d'expérience, la régression et l'optimisation

Nous procédons comme dans le paragraphe précédent. Le plan d'expérience choisi est un plan Latin, avec 15 combinaisons des paramètres d'entrée, à l'intérieur des intervalles choisis et reportés dans le tableau II.5.

Les 150 simulations réalisées ont généré 150 fichiers-réponses qui ont été réduits à 15, possédant chacun trois réponses. Les macromodèles calculés par régression sont définis par les coefficients reportés dans le tableau II.9. Les indices des facteurs sont attribuées ainsi: $x_1 = VIO0$, $x_2 = VIOE$ et $x_3 = VCOX$.

La régression effectuée donne les coefficients de régression reportés dans le tableau II.10. Ici la régression est meilleure que celle effectuée pour la calibration des paramètres du nitrure. En effet, si l'on compare ces résultats à ceux obtenus dans le cas du nitrure (tableau II.10), on observe que chaque coefficient est plus proche de 1. Ceci est dû au fait que, ici, nous avons utilisé les paramètres du nitrure qui ont été calibrés précédemment (section II.2.3), tandis que pour le nitrure, nous avons utilisé les valeurs par défaut des paramètres de l'oxyde.

Comme pour le nitrure, ces modèles ont été vérifiés graphiquement (Figure II.9), par des diagrammes de pareto et des confrontations réponses-calcul.

Indice i,j	Coefficients $a_{i,j}$ du modèle de la réponse		
	diff-fox	diff-padox	diff-edgnit
0. 0	0.86776	0.17785	0.79753
1. 0	0.26417	0.21061	1.57826E-02
2. 0	-4.35369E-03	-4.39876E-03	-0.22533
3. 0	-0.12752	-0.18776	5.73774E-02
1. 2	0.55419	0.67561	0.83124
1. 3	0.15598	-0.17407	-0.31501
2. 3	0.47019	-3.10178E-02	0.45959
1. 1	0.17861	0.35208	0.38367
2. 2	0.50578	0.53435	0.31407
3. 3	-0.24971	0.15452	-0.24864

Tableau II.9 – Coefficients $a_{i,j}$ des macromodèles des réponses “diff-fox”, “diff-padox” et “diff-edgnit” pour la calibration des paramètres de l’oxyde.

Réponse	R^2	R_a^2	R_{pr}^2
diff-fox	0.96	0.90	0.73
diff-padox	0.95	0.84	0.62
diff-edgnit	0.97	0.88	0.74

Tableau II.10 – Valeurs des coefficients de régression calculés pour les réponses

Les diagrammes de pareto (Figure II.9) diagrammes a), c), e)) pour la calibration des paramètres de l’oxyde montrent:

- Contrairement au nitrure, les trois facteurs calibrés de l’oxyde ont une influence à peu près identique sur les réponses puisque les valeurs des coefficients sont du même ordre de grandeur.
- Comme pour le nitrure, ce sont les combinaisons des facteurs et plus particulièrement $VIOO \star VIOE$ qui ont une majeure influence. Ceci signifie que les facteurs sont fortement corrélés entre eux.
- L’énergie d’activation de la viscosité a plus d’influence sur “diff-fox” et sur “diff-pad” que sur “diff-edgnit”.

La confrontation entre les résultats de la simulation et ceux du modèle (graphes b), d), f)) montrent une faible dispersion des points simulés par rapport à la courbe modélisée. Ceci confirme les valeurs plus élevées des coefficients de régression (tableau II.10).

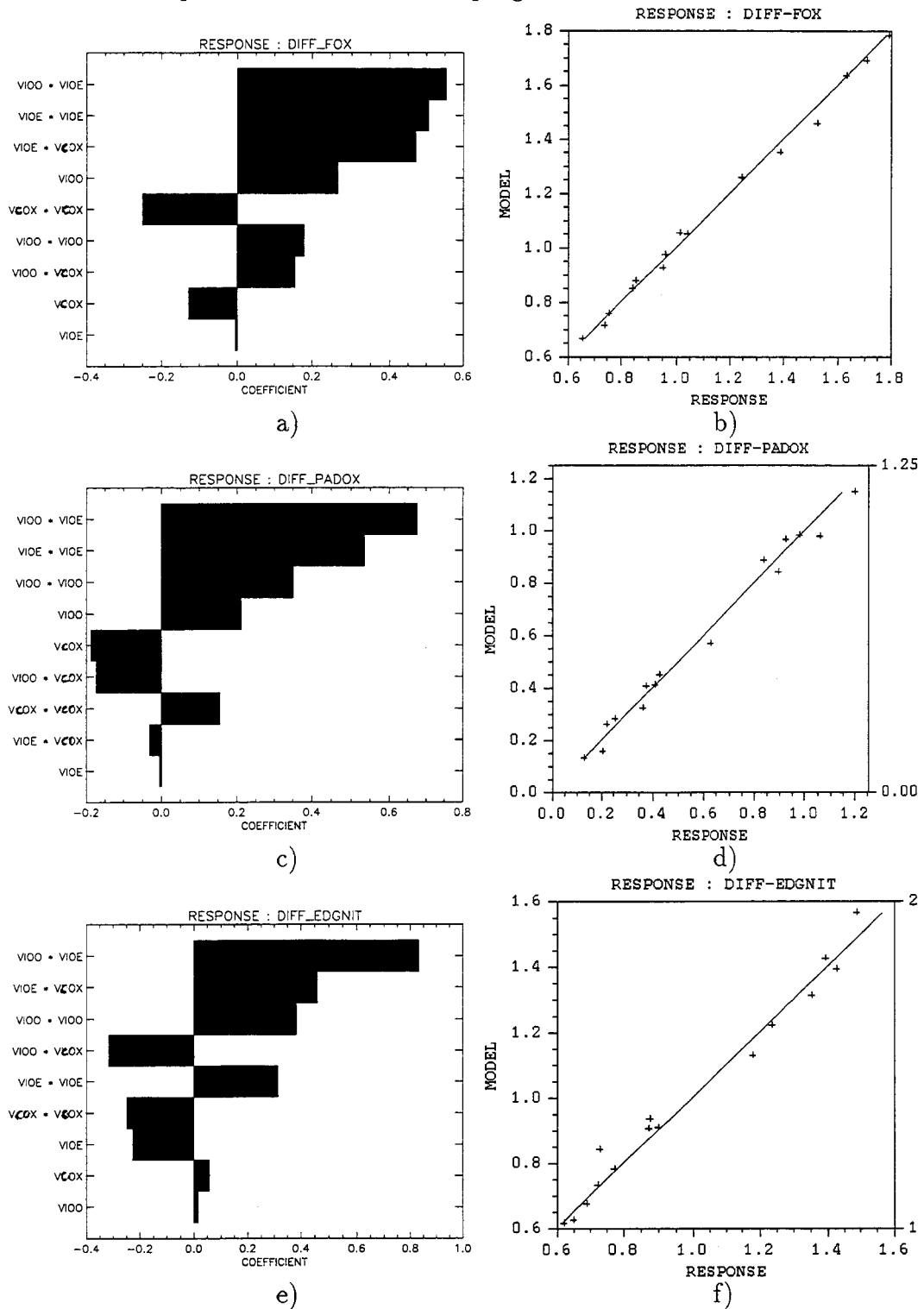


Figure II.9 – Calibration des paramètres de l'oxyde. a), c) et e) sont respectivement les diagrammes de pareto de diff-fox, diff-padox et diff-edgnit. b), d) et f) sont les confrontations entre les macromodèles calculés et les réponses correspondantes, pour chaque jeu de paramètre.

Les deux méthodes utilisées pour l'optimisation des paramètres d'entrée convergent, et les valeurs optimisées sont dans le tableau II.11.

VIO0 (Poises)	VIOE (eV)	VCOX (\AA^3)
5.55	2.3	800

Tableau II.11 – Valeurs calibrées des paramètres de l'oxyde.

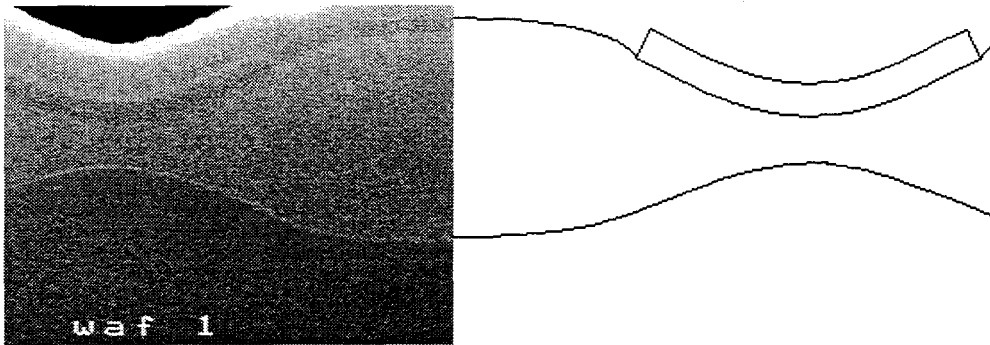
Nous pouvons alors écrire la viscosité de l'oxyde, en fonction de la température:

$$\eta_{(T)}^{(ox)} = 10^{5.55} \exp\left(\frac{2.3}{kT}\right) = 3.55 \cdot 10^5 \exp\left(\frac{2.3}{kT}\right) \quad (\text{Poises}) \quad (\text{II.19})$$

La calibration des paramètres de l'oxyde et du nitrure va maintenant permettre de reproduire avec précision les dix structures du tableau II.1.

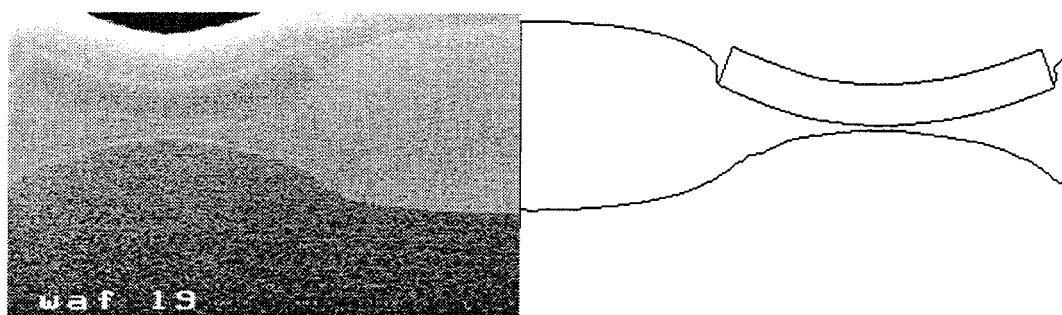
b) Résultats de la calibration

En appliquant les valeurs calibrées à la simulation des structures définies dans le tableau II.1 et en confrontant les résultats de ces simulations aux expériences, nous obtenons un très bon accord. Les Figures II.10 a)-j) représentent la confrontation entre les simulations et les résultats expérimentaux (photo SEM).

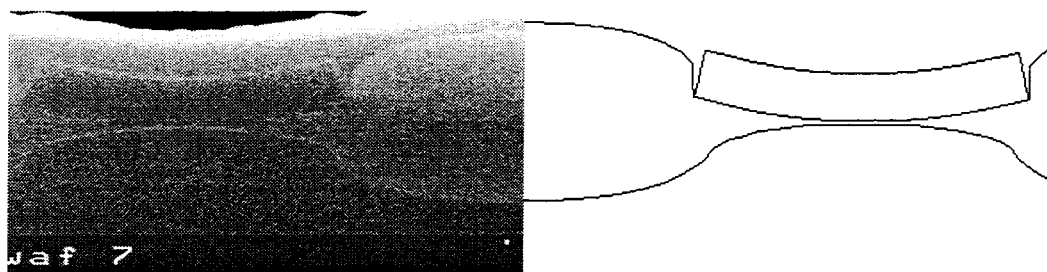


a)

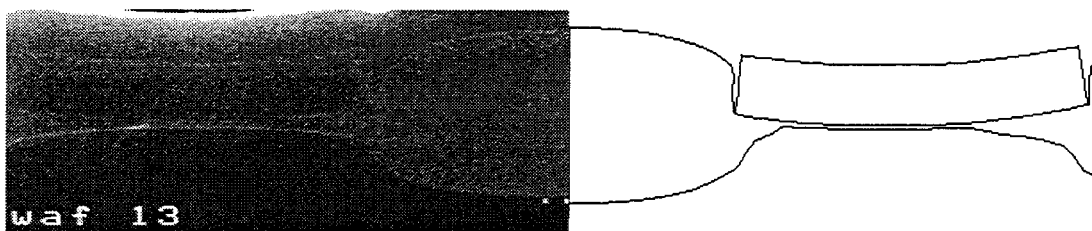
Figure II.10 – Confrontation entre la simulation et l'expérience (photo SEM de LOCOS): a) $T_{\text{oxydation}} = 920^\circ\text{C}$, $t_{\text{oxydation}} = 390\text{min}$, ép. nitrure = 900\AA . Le piédestal d'oxyde de la structure a une épaisseur de 150\AA .



b)

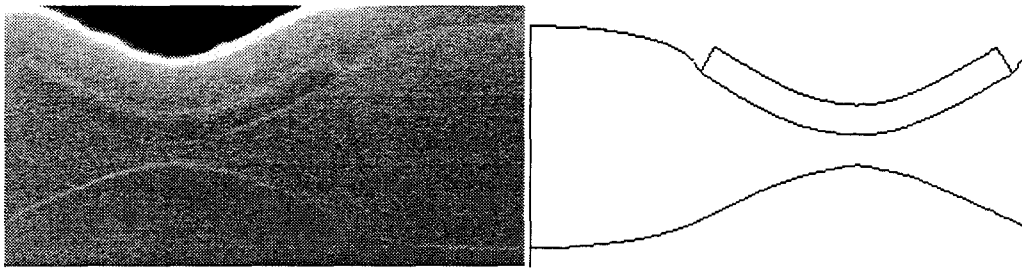


c)

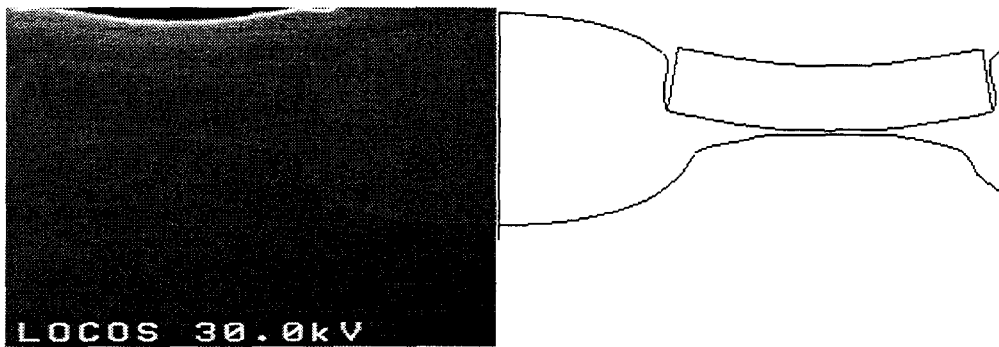


d)

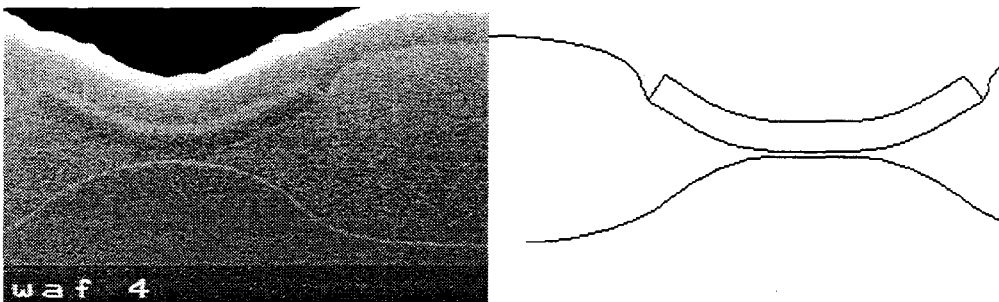
Figure II.10 - Confrontation entre la simulation et l'expérience (photo SEM de LOCOS): b) $T_{\text{oxydation}} = 920^{\circ}\text{C}$, $t_{\text{oxydation}} = 390\text{min}$, ép. nitrure=1300Å; c) $T_{\text{oxydation}} = 920^{\circ}\text{C}$, $t_{\text{oxydation}} = 390\text{min}$, ép. nitrure=1600Å; d) $T_{\text{oxydation}} = 920^{\circ}\text{C}$, $t_{\text{oxydation}} = 390\text{min}$, ép. nitrure=2000Å. Le piédestal d'oxyde de chaque structure a une épaisseur de 150Å.



e)

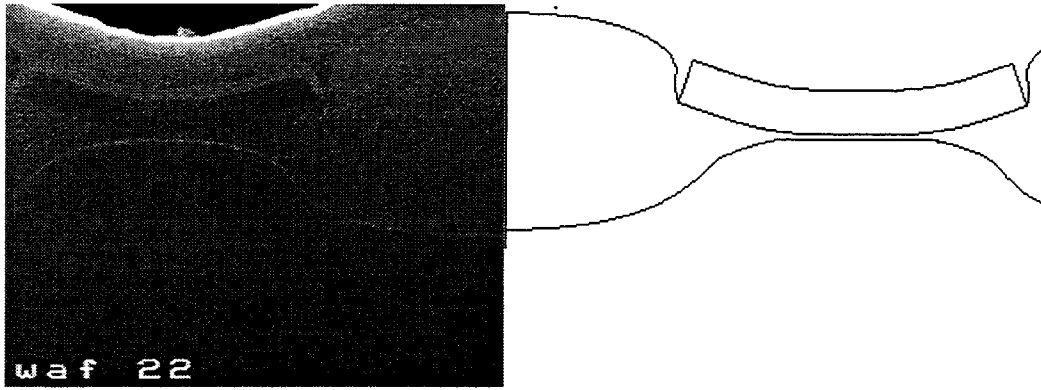


f)

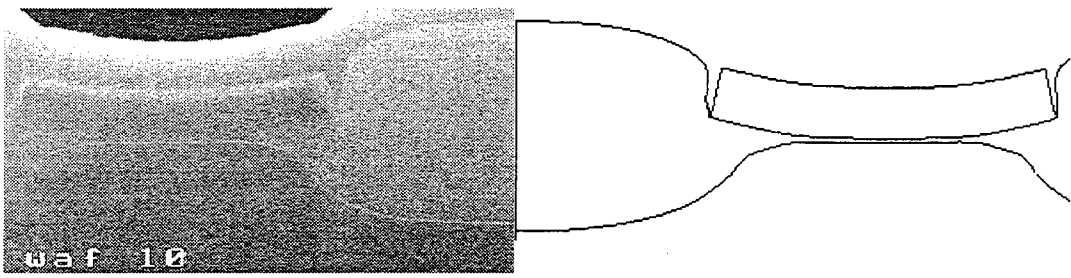


g)

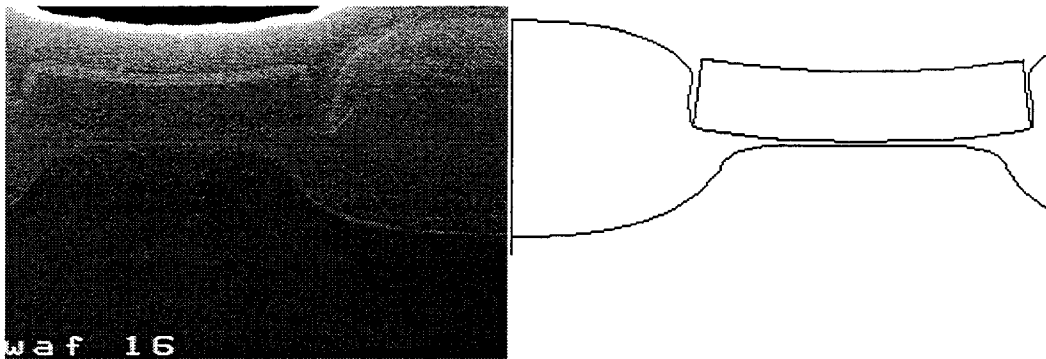
Figure II.10 - Confrontation entre la simulation et l'expérience (photo SEM de LOCOS): e) $T_{\text{oxydation}} = 1000^{\circ}\text{C}$, $t_{\text{oxydation}} = 180\text{min}$, ép. nitrure= 900\AA ; f) $T_{\text{oxydation}} = 1000^{\circ}\text{C}$, $t_{\text{oxydation}} = 180\text{min}$, ép. nitrure= 2000\AA ; g) $T_{\text{oxydation}} = 1100^{\circ}\text{C}$, $t_{\text{oxydation}} = 75\text{min}$, ép. nitrure= 900\AA . Le piédestal d'oxyde de chaque structure a une épaisseur de 150\AA .



h)



i)



j)

Figure II.10 - Confrontation entre la simulation et l'expérience (photo SEM de LOCOS): h) $T_{oxydation} = 1100^{\circ}C$, $t_{oxydation} = 75min$, ép. nitrure=1300Å; i) $T_{oxydation} = 1100^{\circ}C$, $t_{oxydation} = 75min$, ép. nitrure=1600Å; j) $T_{oxydation} = 1100^{\circ}C$, $t_{oxydation} = 75min$, ép. nitrure=2000Å. Le piédestal d'oxyde de chaque structure a une épaisseur de 150Å.

Les facteurs $V_c^{(ox)}$ et $V_c^{(nit)}$ ont pu être calibrés indépendamment de la température. La valeur de la viscosité de l'oxyde est environ deux fois plus élevée que celles calibrées par V. Senez [24] et par G. Carnevale [30]. Celle de la viscosité du nitrure est environ dix fois plus grande que celle calibrée par V. Senez. Ces différences peuvent être attribuées au fait que nous avons cherché à exprimer les volumes d'activation $V_c^{(ox)}$ et $V_c^{(nit)}$ comme étant indépendants de la température, ainsi qu'aux légères différences des caractéristiques physiques des matériaux, liées à des technologies légèrement différentes.

Cependant, si l'on utilise ces paramètres calibrés pour réaliser la simulation d'une structure LOCOS plus petite (pitch=1.45 μm) et enterrée, on a la mauvaise surprise d'obtenir un désaccord entre expérience et simulation (Figure II.11).

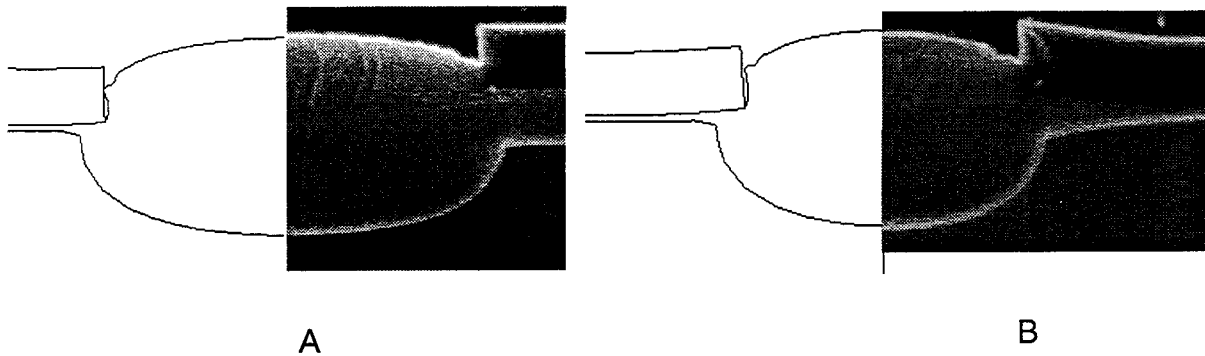


Figure II.11 – Deux structures LOCOS enterrées, de largeur de pitch 1.45 μm , simulées avec les paramètres calibrés dans la partie II.2, et confrontées au résultat expérimental. La simulation et la photo correspondante ne sont pas superposables.

La calibration précédente n'est donc pas applicable à des structures petites, et enterrées. Comme il a été évoqué au début de ce chapitre, on peut expliquer ceci par le fait que la calibration précédemment effectuée n'est que "locale", c'est à dire qu'elle n'a pas été faite sur une gamme suffisamment large de structures. Donc, nous avons recherché une autre série de valeurs des facteurs qui permettrait de simuler des structures de 2.00 μm ainsi que de plus petites (de 1.45 μm ou moins), pour des épaisseurs de nitrure et des températures d'oxydation variables. Nous rapportons dans la section II.3, la calibration de tous les paramètres relatifs à l'oxydation du silicium, y compris V_d et V_k , afin d'être certains que tous les phénomènes (effet des contraintes sur les viscosités, la diffusion et la vitesse de réaction...) sont pris en compte.

Les paramètres qui restent inchangés sont le coefficient de diffusion $D_o^{(si)}$ (équation (III.21)) et la constante de réaction k_s (équation (III.22)) à faible niveau de contraintes. En effet, ceux-ci sont issus des coefficients linéaire et parabolique de Deal et Grove, pour lesquels nous avons obtenu un bon accord entre simulations et expériences mono-dimensionnelles [24].

Les paramètres que nous voulons calibrer sont donc: $\eta_{(T)}^{(ox)}$, $Vc^{(ox)}$, $\eta_{(T)}^{(nit)}$, $Vc^{(nit)}$, Vd , Vk . Le processus de calibration est décrit dans la section II.3.

II.3 Seconde calibration

La méthode est semblable à celle utilisée pour la première calibration, puisque nous avons utilisé la RSM. La calibration des six paramètres $\eta_{(T)}^{(ox)}$, $Vc^{(ox)}$, $\eta_{(T)}^{(nit)}$, $Vc^{(nit)}$, Vd , Vk , à 1000°C et 1100°C, a été obtenue en réalisant successivement cinq plans d'expérience. Dans cette partie, nous présentons d'abord les caractéristiques des structures de référence puis une description succincte de la démarche que nous avons adoptée dans cette seconde calibration est donnée, suivi d'une présentation détaillée de chaque plan d'expérience. Enfin, les résultats de la calibration sont appliqués à une série de structures; les simulations sont confrontées au résultats expérimentaux des photos SEM.

II.3.1 Description des structures de référence et présentation des cinq plans d'expérience

Les huit structures de référence ont les caractéristiques technologiques décrites dans le tableau II.12. Il s'agit de structures LOCOS enterré.

Les cinq plans d'expérience A-B-C-D et E réalisés dans cette seconde calibration sont détaillées ci-dessous.

- **Plan A:** les structures utilisées sont I et II. Le résultat de cette optimisation. Cette calibration est le point de départ des suivants. Il a permis de calibrer approximativement les paramètres influant le plus sur l'épaisseur de l'oxyde de champ: Vis_{ox} (le logarithme de la viscosité de l'oxyde: $\log(\eta_{(T)}^{(ox)})$) et $Vc^{(ox)}$. Ayant déterminé ces valeurs, nous nous sommes intéressés à la reproduction de l'épaisseur d'oxyde sous le piédestal, en calibrant Vd , Vk , Vis_{ni} (le logarithme de la viscosité du nitrure: $\log(\eta_{(T)}^{(nit)})$) et $Vc^{(nit)}$ qui influent le plus sur cette grandeur géométrique.

- **Plan B:** les structures utilisées I-II-III-IV. Les simulations, réalisées avec les valeurs calibrées, reproduisent avec précision l'épaisseur d'oxyde en cas de perçage du piédestal.

- **Plan C:** les structures utilisées sont I-II-III-IV. Ici, le plan est une itération sur les deux précédents qui permet d'ajuster $Viscox$ et $Vc^{(ox)}$ à partir des valeurs de $Vd, Vk, Viscni$ et $Vc^{(nit)}$ déterminés en B. L'ensemble de ces paramètres permet de simuler une large gamme de structures oxydées à 1000°C.

- **Plan D:** les structures utilisées sont V-VI-VII-VIII. Il est conçu pour calibrer les paramètres dépendants de la température, $Viscox$ et $Viscni$, pour $T=1100^\circ C$. Cependant, nous nous sommes heurtés à l'impossibilité de reproduire des structures ayant un nitrure étroit, oxydées à 1100°C. Il est apparu qu'il manquait un degré de liberté à notre calibration et nous avons dû tenir compte d'une dépendance en température pour $Vc^{(ox)}$, contrairement aux objectifs que nous nous étions fixés en II.2.2 c).

- **Plan E:** les structures utilisées sont V-VI-VII-VIII. Elle nous a permis de calibrer $Viscox, Viscni$ et $Vc^{(ox)}$, pour une température de 1100°C.

id.	Pitches (μm)	Temps et Températures d'oxydation (min) ($^\circ C$)		Epaisseurs du nitrure (μm)	Epaisseurs du piédestal (μm)	Gravure du silicium (μm)	Largeurs du nitrure (μm)
I	1.45	120	1000	0.1600	0.0150	0.0500	0.4370
II							0.7990
III	1.45	120	1000	0.1200	0.0150	0.0500	0.5170
IV							0.8000
V	1.30	50	1100	0.1200	0.0100	0.1000	0.5560
VI							0.9140
VII	1.00	50	1100	0.1200	0.0100	0.1000	0.4620
VIII							0.6760

Tableau II.12 – *Caractéristiques technologiques des structures LOCOS enterrés, fabriquées chez STMicroelectronics, utilisées pour la seconde calibration.*

La même méthodologie a été adoptée pour chacun de ces plans.

II.3.2 Méthode utilisée pour chaque calibration

a) Le plan d'expérience

Comme nous l'avons expliqué dans la première calibration, pour pouvoir réaliser un plan d'expérience, il faut déterminer les intervalles de variation des paramètres à calibrer. Pour le plan d'expérience A, la définition de ces intervalles a été réalisée à partir de données prises dans la littérature et obtenues à l'issue de la première calibration. Elles sont regroupées dans le tableau tableau II.13.

Auteur	Vd (Å ³)	Vk (Å ³)	$\eta_{(T)}^{(ox)}$ (Poises)	Vc ^(ox) (Å ³)	$\eta_{(T)}^{(nit)}$ (Poises)	Vc ^(nit) (Å ³)
Senez [24]	75	15	$2 \cdot 10^{14}$	425	$5 \cdot 10^{15}$	170
Rafferty [22]	65	12.5	$2.25 \cdot 10^{14}$	425	$1.8 \cdot 10^{15}$	0
Smeys [34]	65	12.5	$2.8 \cdot 10^{13}$	522	$4.7 \cdot 10^{13}$	0
Poncet [47]	25	2	/	/	/	
Adequat [36]	68.4	24.2	$4.38 \cdot 10^{14}$	584	$9.34 \cdot 10^{14}$	0
Carnevale [30]	75	15	$2 \cdot 10^{14}$	425	$8 \cdot 10^{14} - 5 \cdot 10^{15}$	0
Résultats de la première calibration	75	15	$4.5 \cdot 10^{14}$	800	$7.2 \cdot 10^{16}$	200

Tableau II.13 – Valeurs des six paramètres, d'après différents travaux de calibration, pour des structures d'isolement fabriquées à 1000°C.

Nous avons créé le plan d'expérience A "à la main". Ainsi, un plus grand nombre de valeurs peut être attribué à chaque paramètre (pour un plan CCF, seules trois valeurs sont générées). De plus, un meilleur contrôle de ces valeurs est assuré, alors que, par exemple, avec un plan Latin, les valeurs pour chaque expérience sont générées aléatoirement. Trois valeurs ont été attribuées à Vk , quatre à Vd , $Viscox$, $Vc^{(ox)}$, $Vc^{(nit)}$ et six à $Viscni$. En effet, c'est sur ce dernier paramètre qu'il existe la plus grande incertitude (voir tableau II.13).

Pour les plans d'expérience B-C-D et E, les intervalles sont ajustés à l'aide des résultats de la régression et de l'optimisation du plan précédent. Pour chacun, le plan CCF a été choisi, parce qu'il a été supposé que les intervalles adoptés étaient suffisamment étroits pour que les expériences produites soient bien réparties dans l'espace des facteurs. Ceci a été confirmé par les valeurs élevées des coefficients de régression (> 0.90). Il n'était donc pas nécessaire d'utiliser un plan plus complexe.

Pour la plan A, il y a au total, $3 \times 4 \times 4 \times 4 \times 4 \times 6 = 4608$ combinaisons. Les 4608 simulations correspondantes ont été réalisées avec IMPACT-4. Pour les structures I et II, nous avons obtenu $4608 \times 2 = 9216$ structures simulées au bout d'un mois et demi. Les simulations ont été réalisées en parallèle sur dix machines (SUN Ultra), 24 heures sur 24. Environ 15% ont été éliminées, pour raison d'asymétrie ou parce qu'elles n'ont jamais abouti.

b) La régression

Les réponses qui ont été extraites de chaque simulation sont: l'épaisseur de l'oxyde de champ ("fox"); l'épaisseur du piédestal d'oxyde au centre du film de nitrure ("padox"); la moyenne des épaisseurs d'oxyde à chaque bord du nitrure ("moyedg"=(edgni1+edgni2)/2). Elles sont indiquées sur la Figure II.12.

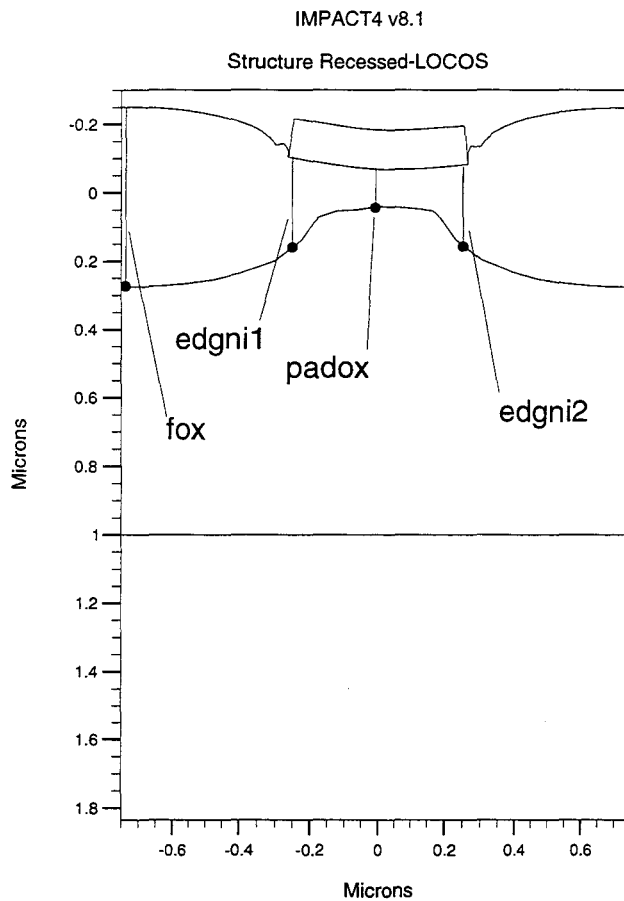


Figure II.12 – Simulation d'une structure LOCOS enterré. Les quatre épaisseurs d'oxyde extraites qui permettent de définir les trois réponses sont indiquées sur la figure: "fox", "padox", "edgni1" et "edgni2".

Une fois le plan exécuté et les réponses recueillies, nous avons effectué la régression en utilisant les deux programmes de RSM: Ulysses [7] et GENESISe [37].

Ulysses ne peut traiter simultanément que 999 expériences. Or, pour le plan A, nous avons pour chaque structure près de 4000 expériences à analyser. Malgré la modification du code, il n'a été possible de réaliser que la régression. L'optimisation a abouti à un dépassement de capacité. Nous avons donc utilisé un autre programme: GENESISe. GENESISe est une interface graphique, développée par ISE (Integrated Systems Engineering), à Zurich, Suisse, qui facilite la gestion et l'utilisation des outils de simulation de l'ISE-TCAD [37]. Les simulations peuvent être organisées sous forme de projets, et des plans d'expérience peuvent être créés à partir de combinaisons des facteurs, comme avec Ulysses.

Plusieurs modèles de régression peuvent être utilisés: linéaire, quadratique, avec transformation de la réponse (en logarithme...). Le modèle le plus adapté est celui pour lequel les coefficients de régression sont les plus élevés (> 0.90). C'est en général le modèle quadratique qui a été choisi pour la suite de la calibration.

c) L'optimisation

Dans GENESISe, l'optimisation consiste à trouver les valeurs des paramètres x_i telles que la différence entre la valeur-objectif normalisée Tn_y , de la réponse y , et le résultat normalisé du macromodèle $yn(x_i)$ soit proche de "0". Lorsque plusieurs réponses sont modélisées (ici il y en a trois), il faut trouver une série unique de valeurs des x_i qui remplisse cette condition pour chaque réponse. On effectue alors la somme de la différence ($Tn_y - yn(x_i)$) pour toutes les réponses, et c'est cette somme qui doit tendre vers "0".

La valeur-objectif non-normalisée T_y est déterminée par la mesure. Or, si, par exemple, l'erreur sur la mesure d'une des réponses nommée y_1 est plus faible que pour les autres, alors il est nécessaire que la valeur $y_1(x_i)$ (si elle est normalisée $yn_1(x_i)$) trouvée après optimisation des x_i soit davantage voisine de T_{y_1} (si elle est normalisée Tn_{y_1}). Pour tenir compte de l'importance relative des réponses les unes par rapport aux autres, un poids p_y peut être

attribué à chaque réponse. Dans GENESISe, l'optimisation consiste donc à résoudre l'équation (II.20).

$$\sum_y p_y \cdot (y_n(x_i) - Tn_y)^2 \rightarrow 0 \quad (\text{II.20})$$

Si plusieurs optimisations sont réalisées, en modifiant à chaque fois le poids des réponses, et si on obtient des séries de x_i optimisés très différentes, alors, ceci signifie que quelque soient les valeurs de x_i , les macromodèles n'arrivent pas à prédire avec suffisamment de précision les valeurs-objectif T_y . Un macromodèle non prédictif a pour origine un mauvais choix du modèle de régression, du plan d'expérience ou des intervalles.

Dans les calibrations qui ont été effectuées, pour chaque plan nous avons réalisé plusieurs optimisations en modifiant le poids des réponses, afin d'évaluer le pouvoir prédictif des macromodèles et la cohérence entre les valeurs x_i optimisées. Les poids ont été attribués en fonction des erreurs relatives sur les mesures ((erreur de la mesure)/(épaisseur mesurée)), en sachant que l'erreur sur la mesure des épaisseurs sur les photos SEM sont pour le "padox" et le "fox" de $0.02 \mu m$, et pour le "moyedg" de $0.04 \mu m$. Ces erreurs sont liées intrinsèquement au SEM.

Enfin, chaque série de paramètres obtenue par optimisation est utilisée pour simuler les structures de référence. Le résultat morphologique simulé est confronté au résultat expérimental donné par la photo SEM.

La section suivante décrit en détail chacun des cinq plans.

II.3.3 Description des plans d'expérience

Dans les cinq tableaux suivants, les étapes des cinq plans sont détaillées. L'application de cette méthodologie à des structures oxydées à $920 \text{ }^\circ\text{C}$ est décrite dans le sixième tableau.

PLAN A: 6 PARAMETRES - AJUSTEMENT GLOBAL		
PLAN	REGRESSION	OPTIMISATION
<p>- <u>structures de référence</u>: I-II</p> <p>- <u>6 paramètres à calibrer</u>: $V_k, V_{iscox}, V_c^{(ox)}, V_d, V_{iscni}, V_c^{(nit)}$</p> <p>- <u>intervalles choisis à partir du tableau II.13</u>:</p> <p>$V_k=[10-50] (\text{\AA}^3)$ $V_d=[30-100] (\text{\AA}^3)$ $V_{iscox}=[14-15]$ $V_c^{(ox)}=[300-800] (\text{\AA}^3)$ $V_{iscni}=[14-16]$ $V_c^{(nit)}=[10-300] (\text{\AA}^3)$</p> <p>- <u>plan d'expérience fait à la main</u>:</p> <ul style="list-style-type: none"> * pour une meilleure répartition des valeurs, * pour un meilleur contrôle des valeurs utilisées: <p>$V_k=10 \ 30 \ 50$ $V_d=30 \ 53.33 \ 76.67 \ 100$ $V_{iscox}=14 \ 14.33 \ 14.67 \ 15$ $V_c^{(ox)}=300 \ 466.67 \ 633.33 \ 800$ $V_{iscni}=14 \ 14.4 \ 14.8 \ 15.2 \ 15.6 \ 16$ $V_c^{(nit)}=10 \ 106.66 \ 203.33 \ 300$</p>	<p>- <u>réponses</u>: fox, padox, moyedg (voir Figure II.12)</p> <p>- <u>meilleur modèle</u>: quadratique</p> <p>- <u>coefficients de régression</u>: $R^2 > 0.90$ $R_a^2 > 0.90$ $R_{pr}^2 > 0.90$ \Rightarrow Modèle quadratique: convient Nombre d'expériences: convient Répartition des expériences: convient.</p> <p>- <u>coefficients ayant une majeure influence sur</u>:</p> <ul style="list-style-type: none"> * "fox": $V_d, V_{iscox}, V_c^{(ox)}$ * "padox": $V_d, V_k, V_{iscni}, V_c^{(nit)}$ * "moyedg": $V_d, V_{iscni}, V_c^{(nit)}$ 	<p>- Différents poids sont attribués aux réponses. Différentes séries de valeurs des paramètres sont obtenues par optimisation. Leur comparaison montre que:</p> <ul style="list-style-type: none"> * 4 paramètres varient beaucoup: $V_d, V_k, V_{iscni}, V_c^{(nit)}$, * 2 paramètres varient peu: $V_{iscox}, V_c^{(ox)}$. * certaines valeurs optimisées correspondent à l'une des bornes de l'intervalle correspondant. <p>- <u>Confrontation simulation-expérience pour chaque série</u>:</p> <ul style="list-style-type: none"> * le "padox" et le "moyedg" simulés ne reproduisent pas les résultats expérimentaux: ils sont deux fois moins épais que dans la réalité; * le "fox" simulé se situe dans l'intervalle de sa mesure.

↓

Conclusions

- * Les paramètres calibrés reproduisent bien le "fox", mais pas le "padox" et le "moyedg". **Dans le plan B, nous nous intéressons aux réponses "padox" et "moyedg" et à la calibration des paramètres influant essentiellement dessus: $V_k, V_d, V_{iscni}, V_c^{(nit)}$.**
Remarque: Ce sont aussi ceux qui varient le plus dans les différentes optimisations.
- * Les deux paramètres $V_c^{(ox)}$ et V_{iscox} varient peu au cours des différentes optimisations. Ils sont aussi parmi les plus influents (avec V_d) sur "fox", et parmi les moins influents sur "padox" et "moyedg". **Dans la suite, ils sont fixés aux valeurs optimisées, afin de s'assurer de la quasi non variabilité de "fox".**
- * **Les intervalles des quatre paramètres considérés sont modifiés.** Un premier plan d'expérience B', réalisé avec les intervalles du plan A, prouve la nécessité de réajuster ceux-ci, afin de mieux encadrer les valeurs optimales.

PLAN B: 4 PARAMETRES - PREDICTION DE "PADOX" ET "MOYEDG"		
PLAN	REGRESSION	OPTIMISATION
<ul style="list-style-type: none"> - <u>structures de référence</u>: I-II-III-IV - <u>4 paramètres à calibrer</u>: $V_k, V_{iscni}, V_d, V_{c^{(nit)}}$ - <u>2 paramètres fixés</u>: $V_{iscox} = 14$ $V_{c^{(ox)}} = 300 \text{Å}^3$ - <u>intervalles réajustés</u>: $V_k = [5-70] (\text{Å}^3)$ $V_d = [25-80] (\text{Å}^3)$ $V_{iscni} = [15.5-16.5]$ $V_{c^{(nit)}} = [10-70] (\text{Å}^3)$ - <u>plan d'expérience CCF choisi car</u>: <ul style="list-style-type: none"> * intervalles ajustés: étroits et bien centrés, * preuve: les résultats de la "REGRESSION". 	<ul style="list-style-type: none"> - <u>réponses</u>: fox, padox, moyedg (voir Figure II.12) - <u>meilleur modèle</u>: quadratique - <u>coefficients de régression</u>: $R^2 > 0.95$ $R_a^2 > 0.94$ $R_{pr}^2 > 0.89$ \implies Modèle quadratique: convient Nombre d'expériences: convient Répartition des expériences: convient. - <u>coefficients ayant une majeure influence sur</u>: <ul style="list-style-type: none"> * "fox": V_d * "padox": $V_d; V_k; V_{iscni}$ (nitrures étroits) ou $V_{c^{(nit)}}$ (nitrures larges) * "moyedg": $V_d; V_k; V_{iscni}$ (nitrures étroits) ou $V_{c^{(nit)}}$ (nitrures larges). 	<ul style="list-style-type: none"> - <u>Différents poids sont attribués aux réponses. Différentes séries de valeurs des paramètres sont obtenues par optimisation. Leur comparaison montre que</u>: <ul style="list-style-type: none"> * les valeurs optimisées varient peu. * les valeurs optimisées se situent à l'intérieur des intervalles choisis. - <u>Confrontation simulation-expérience pour chaque série</u>: <ul style="list-style-type: none"> * le "padox" et le "moyedg" simulés se situent dans les intervalles de leur mesure; * le "fox" simulé est plus petit que sa mesure.

⇓

Conclusions

- * Les intervalles de $V_k, V_d, V_{iscni}, V_{c^{(nit)}}$ ont été bien choisis (les valeurs optimisées se situent à l'intérieur des intervalles), et le plan CCF et le modèle quadratique de la régression conviennent (les coefficients de régression sont élevés).
- * Les valeurs calibrées permettent de reproduire précisément le "padox" et le "moyedg", mais pas le "fox". **Dans le plan C, nous nous intéressons à la réponse "fox" et à la calibration des paramètres influant essentiellement dessus.**
- * Nous avons tout d'abord effectué un plan C' où nous avons calibré l'ensemble des trois paramètres concernés: $V_d, V_{iscox}, V_{c^{(ox)}}$. Précisons que V_d est le seul paramètre influant fortement sur chacune des réponses. Les valeurs optimisées à l'aide de ce plan n'a plus permis cependant de reproduire précisément le "padox" et le "moyedg". **Nous avons donc décidé de maintenir la valeur de V_d à celle calibrée ici, et de n'effectuer le plan C qu'avec V_{iscox} et $V_{c^{(ox)}}$.**
- * Les intervalles de ces deux paramètres sont réajustés en s'aidant des résultats de l'optimisation de la calibration A.

PLAN C: 2 PARAMETRES - PREDICTION DE "FOX"		
PLAN	REGRESSION	OPTIMISATION
- <u>structures de référence</u> : I-II-III-IV - 2 paramètres: $Viscox, Vc^{(ox)}$ - 4 paramètres fixés: $Vk = 46 \text{ \AA}^3$ $Vd = 30 \text{ \AA}^3$ $Viscni = 15.69$ $Vc^{(nit)} = 20 \text{ \AA}^3$ - intervalles réajustés: $Viscox = [13.5-14.5]$ $Vc^{(ox)} = [200-500] (\text{ \AA}^3)$ - plan d'expérience CCF choisi car: * intervalles ajustés: étroits et bien centrés, * preuve: les résultats de la "REGRESSION".	- <u>réponses</u> : fox, padox, moyedg (voir Figure II.12) - <u>meilleur modèle</u> : quadratique - <u>coefficients de régression</u> : $R^2 > 0.90$ $R_a^2 > 0.90$ $R_{pr}^2 > 0.90$ \Rightarrow Modèle quadratique: convient Nombre d'expériences: convient Répartition des expériences: convient. - <u>coefficients ayant une majeure influence sur</u> : * "fox": plus influencé par $Viscox$ que par $Vc^{(ox)}$ * "padox": influencé à égalité par: $Viscox, Vc^{(ox)}$ * "moyedg": influencé à égalité par: $Viscox, Vc^{(ox)}$.	- Différents poids sont attribués aux réponses. Différentes séries de valeurs des paramètres sont obtenues par optimisation. Leur comparaison montre que: * les valeurs optimisées varient peu. * les valeurs optimisées se situent à l'intérieur des intervalles choisis. - Confrontation simulation-expérience pour chaque série: * le "padox" et le "moyedg" simulés se situent dans les intervalles de leur mesure; * le "fox" simulé se situe dans l'intervalle de sa mesure.

↓

Conclusions

- * Les intervalles de $Vk, Vd, Viscni, Vc^{(nit)}$ ont été bien choisis (les valeurs optimisées se situent à l'intérieur des intervalles), et le plan CCF et le modèle quadratique de la régression conviennent (les coefficients de régression sont élevés).
- * **Les valeurs calibrées permettent de reproduire précisément les résultats expérimentaux par simulation pour le "fox", le "padox" et le "moyedg":** $Vk = 46 \text{ \AA}^3, Vd = 30 \text{ \AA}^3, Viscox = 14.28, Vc^{(nit)} = 450 \text{ \AA}^3, Viscni = 15.69, Vc^{(nit)} = 20 \text{ \AA}^3$. Quelques exemples sont proposés aux Figures II.19 à II.21.
- * En gardant Vd à la valeur optimisée dans le plan B, nous nous sommes assurés de simuler suffisamment précisément le "padox" et le "fox". Nous avons alors pu calibrer les deux autres paramètres influant sur le "fox".
- * **Les six paramètres ont été calibrés pour une température de 1000°C.** Or les valeurs des viscosités à faible niveau de contraintes du nitrure ($\eta_{(T)}^{(nit)}$) et de l'oxyde ($\eta_{(T)}^{(ox)}$) sont dépendantes de la température. **Donc, nous allons calibrer $Viscox$ et $Viscni$ pour 1100°C. A titre de vérification, nous avons inclus, dans le plan D les deux autres paramètres dont les viscosités $\eta_{(T,\sigma)}^{(ox)}$ et $\eta_{(T,\sigma)}^{(nit)}$ dépendent: $Vc^{(ox)}$ et $Vc^{(nit)}$.**

PLAN D: CALIBRATION A 1100°C		
PLAN	REGRESSION	OPTIMISATION
<ul style="list-style-type: none"> - <u>structures de référence</u>: V-VI-VII-VIII - <u>4 paramètres à calibrer</u>: V_{iscox}, $V_c^{(ox)}$ V_{iscni}, $V_c^{(nit)}$ - <u>2 paramètres fixés</u>: $V_k = 46 \text{Å}^3$ $V_d = 30 \text{Å}^3$ - <u>intervalles pour V_{iscox} et V_{iscni}</u>: choisis à l'aide des résultats obtenus à 1000°C et de la thèse de V. Senez [24]: $V_{iscox}=[12.5-14]$ $V_{iscni}=[14.5-15.5]$. - <u>intervalles pour $V_c^{(ox)}$ et $V_c^{(nit)}$</u>: on conserve les derniers utilisés: $V_c^{(ox)}=[200-500] (\text{Å}^3)$ $V_c^{(nit)}=[10-150] (\text{Å}^3)$. - <u>plan d'expérience CCF</u> choisi car: <ul style="list-style-type: none"> * intervalles ajustés: étroits et bien centrés, * preuve: les résultats de la "REGRESSION". 	<ul style="list-style-type: none"> - <u>réponses</u>: fox, padox, moyedg (voir Figure II.12) - <u>meilleur modèle</u>: quadratique - <u>coefficients de régression</u>: $R^2 > 0.95$ $R_a^2 > 0.95$ $R_{pr}^2 > 0.95$ ⇒ Modèle quadratique: convient Nombre d'expériences: convient Répartition des expériences: convient. - <u>coefficients ayant une majeure influence sur</u>: <ul style="list-style-type: none"> * "fox": V_{iscox}; $V_c^{(ox)}$ (et V_{iscni} quand le nitrure est large) * "padox": V_{iscni}; $V_c^{(nit)}$ (et V_{iscox} quand le nitrure est large) * "moyedg": V_{iscni}; $V_c^{(nit)}$; V_{iscox}. 	<ul style="list-style-type: none"> - <u>Différents poids sont attribués aux réponses</u>. <u>Différentes séries de valeurs des paramètres sont obtenues par optimisation</u>. Leur comparaison montre que: <ul style="list-style-type: none"> * les valeurs optimisées varient beaucoup. * certaines valeurs optimisées correspondent à l'une des bornes de l'intervalle correspondant. - <u>Confrontation simulation-expérience pour chaque série</u>: <ul style="list-style-type: none"> * le "padox" et le "moyedg" simulés ne reproduisent pas les résultats expérimentaux: ils sont fortement moins épais que dans la réalité, surtout pour les structures ayant un nitrure étroit (V et VII); * le "fox" simulé se situe dans l'intervalle de sa mesure.

↓

Conclusions

- * Les résultats de l'optimisation sont mauvais, bien que ceux de la régression soient bons. La réalisation de plans plus complexes (Latin, ajout d'expériences etc...) a donné les mêmes résultats: **le choix du plan n'est pas en cause**.
- * Nous avons alors décidé de conserver $V_c^{(ox)}$ et $V_c^{(nit)}$ aux valeurs calibrées auparavant (respectivement 450Å^3 et 20Å^3), et de ne calibrer que V_{iscox} et V_{iscni} : i) tout d'abord avec un plan CCF, ii) puis en ajoutant des expériences, iii) ensuite en élargissant leurs intervalles, iv) enfin manuellement. Les résultats de l'optimisation ont à chaque fois été aussi mauvais: soit le "padox" et le "moyedg" ne croissaient pas assez (surtout pour les structures V et VII), soit le nitrure se courbait trop.
- * **A titre d'essai, nous ajoutons à nouveau, parmi les paramètres à calibrer, $V_c^{(ox)}$ et $V_c^{(nit)}$ mais en modifiant leurs intervalles: $V_c^{(ox)} = [400 - 900](\text{Å}^3)$; $V_c^{(nit)} = [10 - 100](\text{Å}^3)$.**

PLAN E: CALIBRATION A 1100°C, INTERVALLES MODIFIES

- * Les résultats obtenus par optimisation, à partir de la seconde exécution du plan d'expérience D, sont les suivants: **Viscox = 13.3**, **$V_c^{(ox)} = 775 \text{ \AA}^3$** , **Viscni = 15**, **$V_c^{(nit)} = 20 \text{ \AA}^3$** . Ils permettent aux simulations de reproduire d'une manière relativement prédictive les résultats expérimentaux, en ajoutant: **$V_k = 46 \text{ \AA}^3$** , **$V_d = 30 \text{ \AA}^3$** .
- * Nous avons cherché à obtenir **$V_c^{(ox)}$** et **$V_c^{(nit)}$** indépendants de la température, comme nous l'avions précédemment annoncé dans les paragraphes II.2.2 c) i) et II.2.4 b), mais sans succès, d'où la valeur de **$V_c^{(ox)}$** différente pour 1000°C et 1100°C.
- * Des structures d'isolement étroites ont été utilisées pour effectuer cette calibration. **Il est très possible que les modèles utilisés pour l'oxyde thermique ne tiennent pas compte de tous les phénomènes physiques intervenant dans de telles structures. Ceci pourrait expliquer: i) la nécessité de compenser ces manques en faisant varier $V_c^{(ox)}$ avec la température; ii) la difficulté de simuler avec précision les structures V et surtout VII, à cause de la superposition de l'ensemble de ces phénomènes.**

APPLICATION AUX STRUCTURES OXYDEES A 920°C - APPLICATION AUX LOCOS DU TABLEAU II.1.

- * Pour simuler les structures oxydées à 920°C, du tableau II.1, nous prenons les valeurs suivantes de chacun des six paramètres:
 - **$V_d, V_k, V_c^{(nit)}$** : sont ceux optimisés;
 - **Viscox, Viscnit** : nous rappelons que les viscosités à faible niveau de contraintes, $\eta_{(T)}^{(ox)} (= 10^{(Viscox)})$ et $\eta_{(T)}^{(nit)} (= 10^{(Viscni)})$, sont une fonction exponentielle de l'inverse de la température (équation (II.14)). Nous pouvons donc déduire, des valeur de *Viscox* et *Viscnit* calibrées pour 1000°C et 1100°C, une relation exponentielle, pour $\eta_{(T)}^{(ox)}$ et $\eta_{(T)}^{(nit)}$. Les valeurs des viscosités à 920°C, donc *Viscox* et *Viscni*, sont alors calculées. Ce sont celles que nous avons utilisées pour simuler les structures du tableau II.1 oxydées à 920°C.
 - **$V_c^{(ox)}$** : dans un premier temps nous avons pris la même valeur que celle calibrées pour 1000°C, soit 450 \AA^3 .
- * Les résultats expérimentaux et ceux simulés montrent un très bon accord, pour toutes les structures du tableau II.1, qu'elles soient oxydées à 920°C, 1000°C ou 1100°C. Quelques exemples sont exposés Figure II.22.
- * Il ne semble pas nécessaire de calibrer à nouveau $V_c^{(ox)}$, pour 920°C: il peut conserver, ici, sa valeur à 1000°C. La raison peut-être due à la largeur du pitch ($2.0 \mu m$) pour lequel la structure est moins affectée par la superposition de phénomènes physiques (perçage du piédestal, amincissement de l'oxyde de champ...) que des structures plus étroites.

II.3.4 Application des résultats de la calibration

Les résultats de la calibration sont rassemblés dans le tableau II.14.

Paramètres	Vk (Å ³)	Vd (Å ³)	$\eta_{(T)}^{(ox)}$ (Poises)	Vc ^(ox) (Å ³)	$\eta_{(T)}^{(nit)}$ (Poises)	Vc ^(nit) (Å ³)
T1=1000°C	30	46	1.9·10 ¹⁴	450	4.9·10 ¹⁵	20
T2=1100°C			2.0·10 ¹³	775	1.0·10 ¹⁵	

Tableau II.14 – Valeurs calibrées des paramètres, pour deux températures: 1000°C et 1100°C.

Les Figures II.19 à II.23 présentent quelques exemples de structures que nous avons simulées, en utilisant les paramètres qui ont été calibrés. Ces structures sont des LOCOS (Figure II.22) ou des LOCOS enterrés (Figures II.19-II.20-II.21-II.23). Cinq pitches ont été choisis: 1.00 μm (Figure II.19), 1.30 μm (Figure II.20), 1.45 μm (Figure II.21), 2.00 μm (Figure II.22), infini (Figure II.23). Les gravures des structures enterrées ont une profondeur de 0.0500 μm ou 0.1000 μm, et le nitrure a différentes largeurs. Les températures d'oxydation sont les suivantes: 920°C - 1000°C - 1100°C.

Les simulations reproduisent aussi bien l'épaisseur de l'oxyde de champ, que celle sous le nitrure, due au perçage du piédestal d'oxyde. Le bec d'oiseau est lui aussi simulé avec précision. Les structures infinies permettent de bien mettre en évidence la capacité du simulateur à reproduire l'amincissement de l'oxyde de champ avec l'ouverture laissée par les masques de nitrure (Figures II.23 c) et d)), ainsi que la forme du bec d'oiseau (Figures II.23 a) et b)).

La gamme de validité des paramètres calibrés est précisée ci-dessous.

- largeur de pitch: de 2.00 μm à 1.00 μm et structure infinie;
- largeur de nitrure: de 0.9 μm à 0.25 μm et largeur infinie;
- gravure du silicium: de 0 μm à 0.1000 μm;
- épaisseur de nitrure: de 0.09 μm à 0.20 μm;
- température d'oxydation: de 920° à 1100°.

Pour information: Les structures des Figures II.19, II.20, II.21 et II.23 préparées à 1000°C et 1100°C sont oxydées pendant, respectivement, 125 min et 52 min. Les structures de la Figure II.22 oxydées à 920°C, 1000°C ou 1100°C sont oxydées pendant, respectivement, 390 min, 180 min et 75 min.

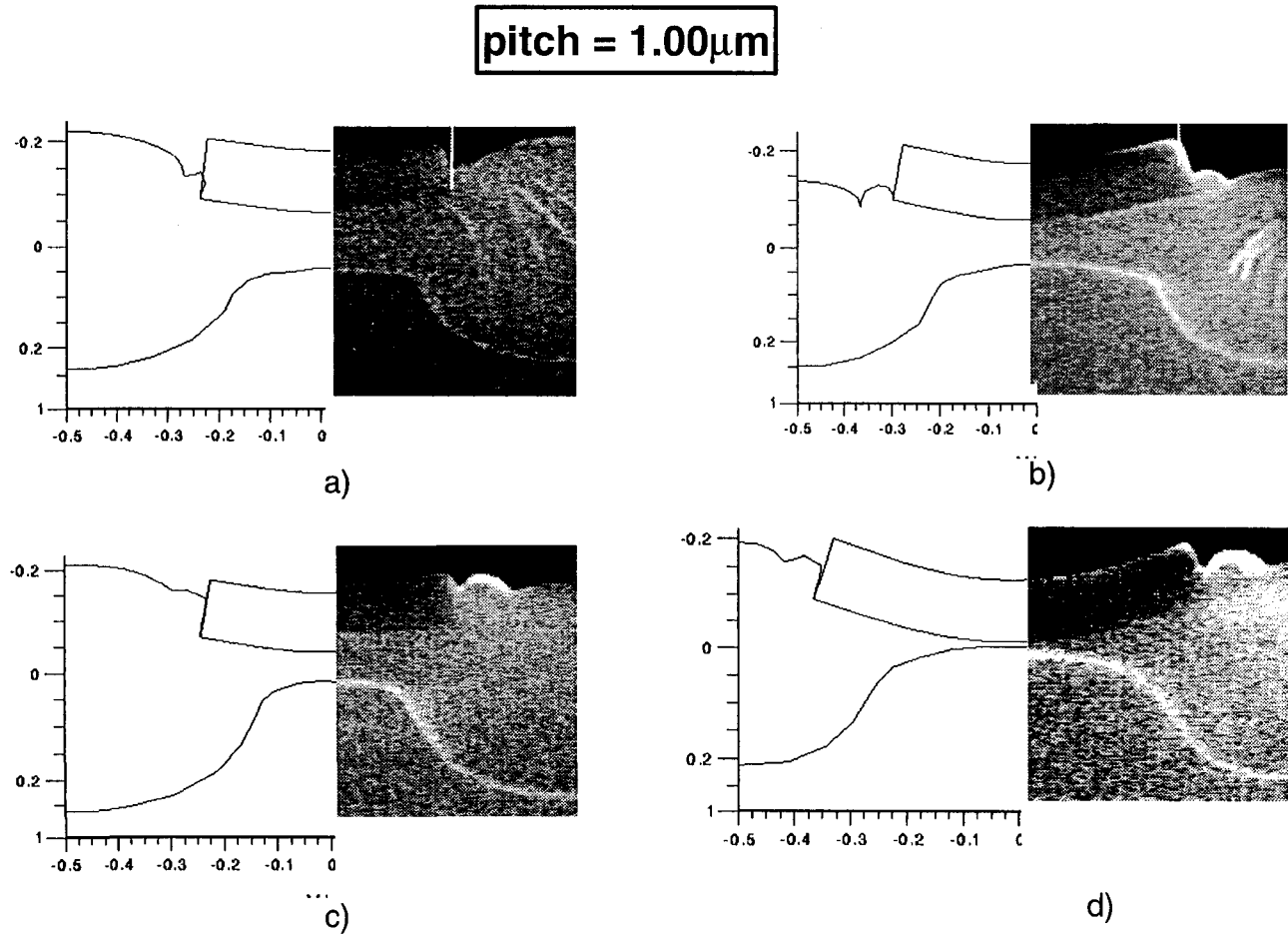


Figure II.19: Confrontation entre la simulation et l'expérience (photo SEM) de structures Recessed-LOCOS ayant un pitch de largeur 1.00 μm . Leurs caractéristiques sont les suivantes: Temp.=1000°C (a, b) ou 1100°C (c, d); ép. piédestal=0.0100 μm ; gravure=0.0500 μm (a) ou 0.1000 μm (b, c, d)); ép. nitrure=0.1200 μm ; largeur du nitrure=0.4750 μm (a), 0.5790 μm (b), 0.4620 μm (c) ou 0.6760 (d).

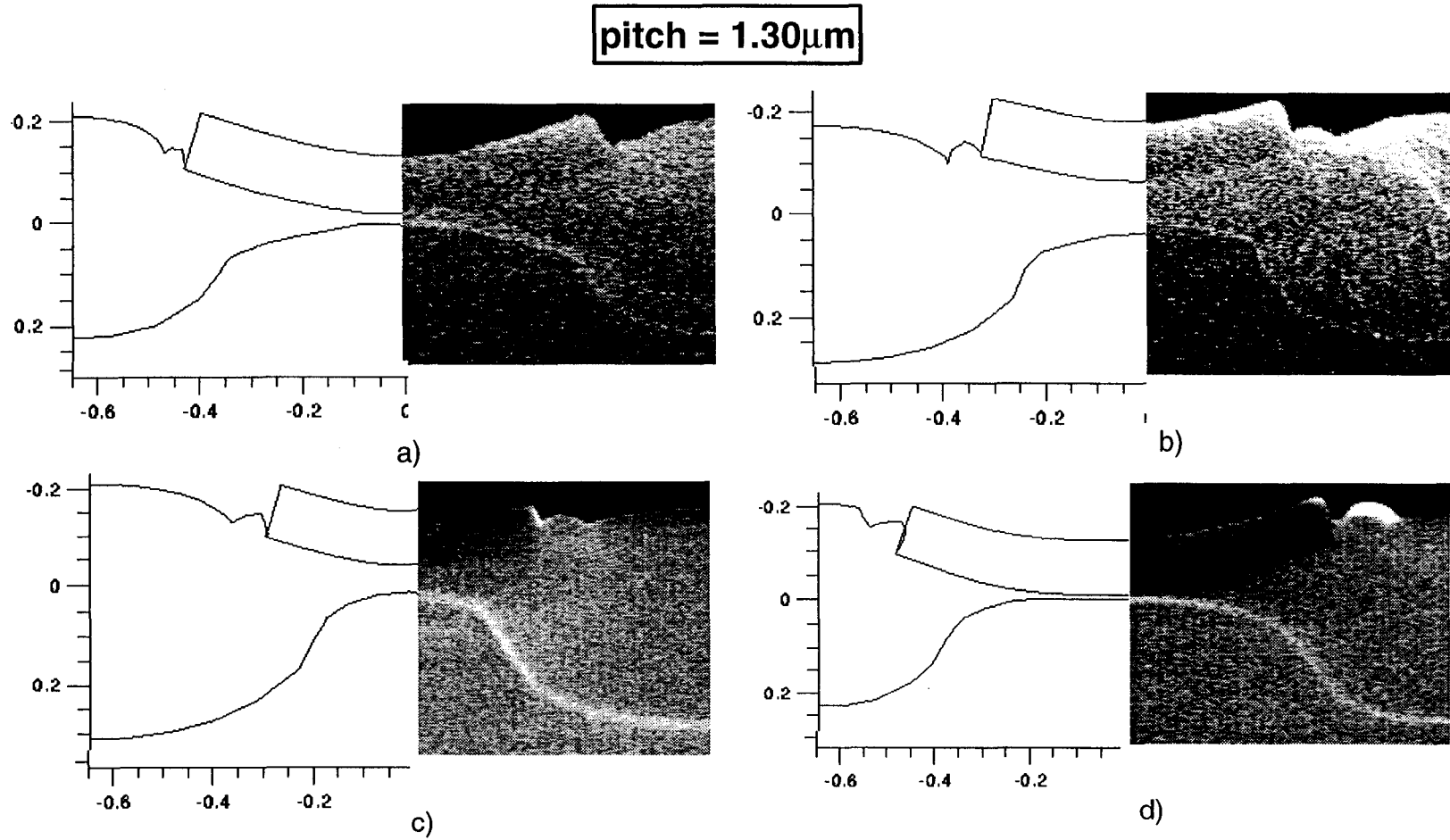


Figure II.20: Confrontation entre la simulation et l'expérience (photo SEM) de structures Recessed-LOCOS ayant un pitch de largeur 1.30 μ m. Leurs caractéristiques sont les suivantes: Temp.=1000°C (a) et b)) ou 1100°C (c) et d)); ép. piédestal=0.0100 μ m; gravure=0.0500 μ m (a) ou 0.1000 μ m; ép. nitrure=0.1200 μ m; largeur du nitrure=0.8500 μ m (a), 0.6200 μ m (b), 0.5560 μ m (c) ou 0.9140 (d).

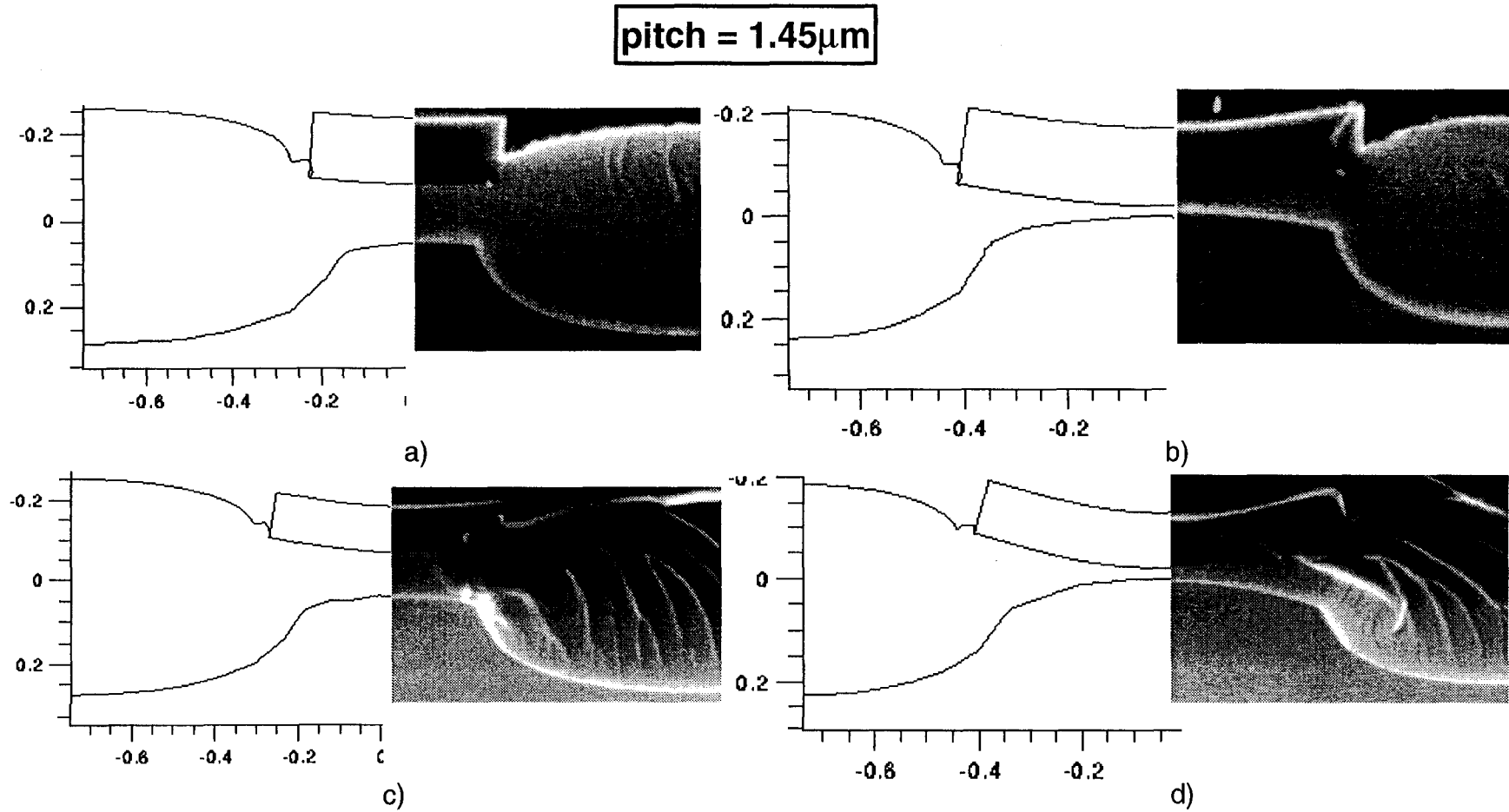


Figure II.21: Confrontation entre la simulation et l'expérience (photo SEM) de structures Recessed-LOCOS ayant un pitch de largeur 1.45 μ m. Ces structures sont celles du tableau 2.17, ayant servi à la calibration. Leurs caractéristiques sont les suivantes: Temp.=1000°C; ép. piédestal=0.0150 μ m; gravure=0.0500 μ m; ép. nitrure=0.1600 μ m (a) et b) ou 0.1200 μ m (c) et d); largeur du nitrure=0.4370 μ m (a)), 0.7990 μ m (b)), 0.5170 μ m (c) ou 0.8000 (d)).

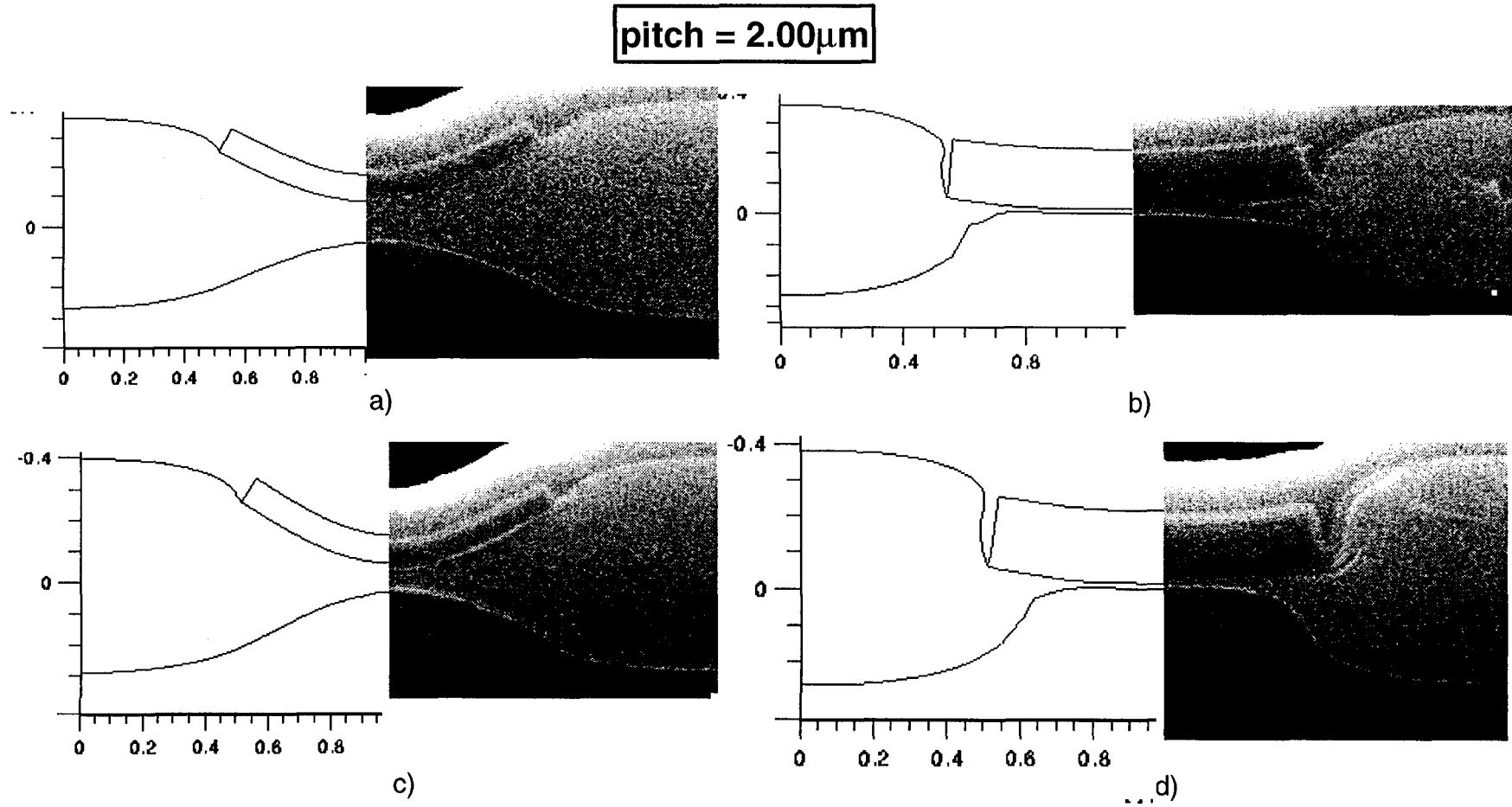


Figure II.22: Confrontation entre la simulation et l'expérience (photo SEM) de structures LOCOS ayant un pitch de largeur 2.00 μ m. Leurs caractéristiques sont les suivantes: Temp.=920°C (a, b)), 1000°C (c) ou 1100°C (d)); ép. piédestal=0.0150 μ m; ép. nitrure=0.1200 μ m; largeur du nitrure=1.00 μ m.

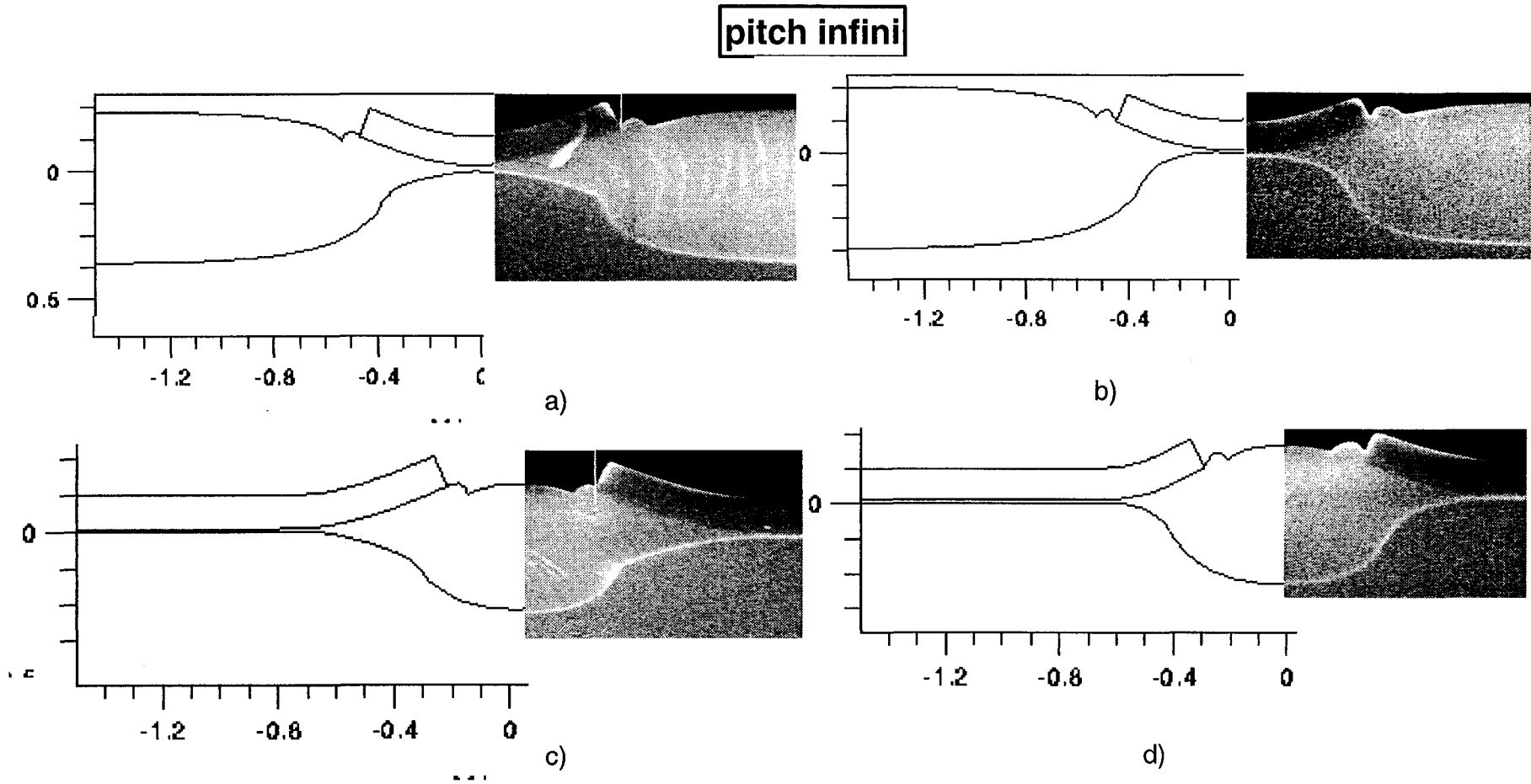


Figure II.23: Confrontation entre la simulation et l'expérience (photo SEM) de structures Recessed-LOCOS ayant un pitch de largeur infinie. Leurs caractéristiques sont les suivantes: largeur infinie de l'oxyde de champ (a), b)) ou du nitrure (c), d)); Temp.=1000°C (a), c)) ou 1100°C (b), d)); ép. piédestal=0.0100 μm ; gravure=0.1000 μm ; ép. nitrure=0.1200 μm ; largeur de l'oxyde de champ=0.9170 μm (a), 0.9090 μm (b)); largeur du nitrure=0.4630 μm (c) ou 0.5440 (d).

II.4 Conclusions

Il a été montré dans ce chapitre que le modèle simple d'oxydation de Deal et Grove [4] était limité aux oxydations mono-dimensionnelles. En effet, l'oxydation de structures bi-dimensionnelles fait intervenir des phénomènes physiques tels que la déformation viscoélastique de l'oxyde et la réduction de la cinétique d'oxydation sous l'effet des contraintes. Ce dernier phénomène, mis en évidence notamment par Kao [5, 6], se traduit par une diminution du coefficient de diffusion $D_o^{(\sigma)}$ et de la constante de réaction $k_s^{(\sigma)}$ en fonction des contraintes, selon les équations (II.6) à (II.9). La déformation de l'oxyde est représentée par un modèle rhéologique viscoélastique non linéaire, et sa viscosité est définie par l'équation de Eyring (équation (II.13)). Le nitrure est représenté par le même modèle viscoélastique non-linéaire. L'oxydation du silicium a été implantée dans IMPACT-4 en utilisant ces modèles. Pour toutes les simulations réalisées, le schéma algorithmique dit "complet" a été choisi, car il permet d'avoir accès aussi bien à la topologie des structures qu'aux contraintes générées au cours des différentes étapes.

Le modèle d'oxydation utilisé pour prédire la topologie et les contraintes des structures d'isolement comprend six facteurs qui ne peuvent être déterminés par mesures ou calculs théoriques: $Vk, Vd, Vc^{(ox)}, \eta_{(T)}^{(ox)}, Vc^{(nit)}, \eta_{(T)}^{(nit)}$. Ce sont ces facteurs qui ont été calibrés à l'aide de plans d'expériences, de régressions et d'optimisations effectuées avec Ulysses [7] et GENESISe [37], deux programmes de RSM (Technique de Régression Statistique). Une première calibration, réalisée seulement sur $Vc^{(ox)}, \eta_{(T)}^{(ox)}, Vc^{(nit)}$ et $\eta_{(T)}^{(nit)}$, a abouti à une série de paramètres optimisés. Cependant, ceux-ci, calibrés pour des structures LOCOS de largeur $2 \mu m$, ne permettent pas de prédire la topologie de structures plus étroites ($1.45 \mu m$ et moins). Une seconde calibration a donc été nécessaire. Elle a été effectuée cette fois-ci sur les six facteurs, et pour des structures de type LOCOS enterré, de largeurs $1.45 \mu m, 1.30 \mu m$ et $1.00 \mu m$, de largeur de nitrure variable et avec des températures d'oxydation différentes ($1000^\circ C$ et $1100^\circ C$). Les valeurs calibrées sont données dans le tableau II.14. Ces valeurs ont été appliquées à d'autres structures, avec succès: largeur de nitrure infini, largeur d'oxyde de champ infini, LOCOS oxydés à $920^\circ C, 1000^\circ C$ et $1100^\circ C$.

D'après le tableau II.14, nous observons que Vk et Vd sont indépendants de la température, comme cela avait déjà été observé par Rafferty [38]. Celui-ci avait montré que Vk et Vd ne dépendaient pas des conditions d'oxydation. V. Senez [24] et G.P. Carnevale [30] dans leur travail de calibration l'ont aussi confirmé. Nous pouvons noter que Vd est pratiquement égale au volume du tétraèdre de SiO_2 obtenu thermiquement ($V(SiO_2) = 45 \text{ \AA}^3$), comme Don-

nadiou en avait fait l'hypothèse dans le cas de la silice amorphe [19].

Les valeurs des viscosités calibrées par V. Senez, G.P. Carnevale et par nous-même sont assez proches les unes des autres: ceci montre une certaine homogénéité des caractéristiques physiques du SiO_2 et du Si_3N_4 , quelque soit la technologie utilisée.

En ce qui concerne les volumes d'activation des viscosités, $V_c^{(nit)}$ a pu être calibré indépendamment de la température, tandis que $V_c^{(ox)}$ n'a pas pu l'être, malgré ce que nous avons annoncé et obtenu dans la première calibration, section II.2.3. Ceci peut s'expliquer par une accentuation des phénomènes physiques se déroulant dans les structures étroites, et dont il a fallu tenir compte en modifiant $V_c^{(ox)}$ avec la température.

Ce travail permet de conclure que l'on ne peut pas calibrer de façon universelle les paramètres utilisés dans un programme de simulation, parcequ'ils dépendent de la technologie à laquelle on a recourt. L'utilisation prédictive de simulateurs nécessite tout d'abord la calibration des paramètres pour cette technologie. D'autre part, plus les structures étudiées sont étroites et complexes, plus la calibration doit être fine et précise, car plus les phénomènes simulés sont d'autant plus sensibles aux valeurs des paramètres. C'est la raison pour laquelle les deux séries de paramètres issues des calibrations 1 et 2 peuvent prédire la topologie des LOCOS de pitch $2 \mu m$ tandis que seule la seconde permet de prédire la topologie de LOCOS enterrés de pitch $1.45 \mu m$ à $1.00 \mu m$.

Afin de poursuivre la réduction des dimensions des structures d'isolement, STMicroelectronics étudie de nouvelles topographies. Ayant calibré de manière prédictive le programme de simulation IMPACT-4, nous pouvons maintenant l'utiliser avec confiance pour étudier ces structures plus complexes. STMicroelectronics a décidé de consacrer une partie de ses efforts de recherche à l'étude du NCLAD. L'efficacité de cette structure se fonde sur la forme du masque de nitrure et est directement liée à l'oxydation de celui-ci, qui a lieu au cours de l'oxydation de champ. L'étude des NCLAD présuppose donc qu'un modèle d'oxydation du nitrure de silicium soit implanté dans nos programmes de simulation. Le chapitre suivant décrit le modèle choisi pour l'oxydation du nitrure, son implantation dans IMPACT-4, ainsi que son application aux simulations de structures d'isolement de type NCLAD.

Bibliographie

- [1] S.H. Goodwin and J.D. Plummer, "Electrical Performances and Physics of Isolation Region Structures for VLSI", *IEEE Trans. Elec. Dev.*, **31**, no. 7, (Jul. 1984), p. 861.
- [2] K. Kurosawa, T. Shibata, "A New Bird's-beak Free Field Isolation Technology for VLSI Devices", *IEDM'81*, (1981), p. 384.
- [3] B. Baccus, D. Collard, P. Ferreira, V. Senez, E. Vandenbossche, "IMPACT-4: Isen Modeling Package For Integrated Circuit Technology, Version 4.8.1", (11/1996).
- [4] B.E. Deal and S.S. Grove, "General relationship for the thermal oxidation of Si", *J. Appl. Phys*, **36**, (1965), p. 3770-3778.
- [5] R. J. Kriegler, Y.C. Cheng and D.R. Colton, *J. Electrochem. Soc.*, **119**, (1972), p. 138.
- [6] K. Hirabayashi, I. Iwamura, *J. Electrochem. Soc.*, **120**, (1973), p. 1595.
- [7] D. Kouvatso, T.G. Huang, R.J. Jacodine, "Fluorine-enhanced oxidation of silicon", *J. Electrochem. Soc.*, **138**, (1991), 1752.
- [8] C.P. Ho, J.D. Plummer, "Si/SiO₂ Interface oxidation kinetics: a physical model for the influence of high substrate doping levels;I theory", *J. Electrochem. Soc.*, **126**, (1979), p. 1516.
- [9] C.P. Ho, J.D. Plummer, "Si/SiO₂ Interface oxidation kinetics: a physical model for the influence of high substrate doping levels;II comparison with experiment and discussion", *J. Electrochem. Soc.*, **126**, (1979), p. 1523.
- [10] E.A. Irene, H. Massoud, E. Tierney, "Silicon Orientation Effects on Thermal Oxidation", *J. Electrochem. Soc.*, **133**, no. 6, (1986), p. 1253.
- [11] R. Marcus, T.T. Sheng, "The oxidation of shaped Si surfaces", *J. Electrochem. Soc.*, **129**, (1982), p. 1278.

- [12] K. Yamabe, K. Imai, "Nonplanar Oxidation and Reduction of Oxide Leakage Currents at Silicon Corners by Rounding-Off Oxidation", *IEEE Trans. Elec. Dev.*, **34**, no. 11, (1987), p. 1681.
- [13] T. Mizuno, S. Sawada, S. Maeda, S. Shinozaki, "Oxidation Rate Reduction in the Submicrometer LOCOS Process", *IEEE Trans. Elec. Dev.*, **34**, no. 11, (1987), p. 2255.
- [14] P.U. Kenkare, J.R. Pfister, J.D. Hayden, R.I. Hedge, V. Kaushik, "Sensitivity of field isolation profiles to active pattern", *IEDM'93*, (1993), p. 479-482.
- [15] J. Hui, P. Vande Voore, J. Moll, "Scaling limitations of submicron local oxidation technology", *IEDM'95*, (1985), p. 392-395.
- [16] D.B. Kao, J.P. McVittie, W.D. Nix, K.C. Saraswat, "2-D thermal oxidation of Si - part I; experiments", *IEEE Trans. Elec. Dev.*, **34**, no. 5, (1987) p. 1008-1017.
- [17] D.B. Kao, J.P. McVittie, W.D. Nix, K.C. Saraswat, "2-D thermal oxidation of Si - part II; modeling stress effects in wet oxides", *IEEE Trans. Elec. Dev.*, **35**, no. 1, (1988) p. 25.
- [18] V. Senez, D. Collard, B. Baccus, M. Brault. J. Lebaillly, "Analysis and Application of a Viscoelastic Model for Silicon Oxidation", *J. Appl. Phys.*, **76**, no. 6, (1994), p. 3285.
- [19] P. Donnadiou, O. Jaoul, M. Kléman, "Plasticité de la Silice Amorphe de part et d'autre de la Transition Vitreuse", *Phil. Mag. A*, **52**, no. 1, (1985), p. 5-17.
- [20] H. Eyring, "Viscosity, Plasticity and Diffusion as Exampplles of Absolute Reaction Rates", *J. Chem. Phys.*, **4**, (1936), p. 283.
- [21] S.M. Hu, "Stress Related Problems in Silicon Technology", *J. Appl. Phys.*, **70**, no. 6, (1991), p. R68.
- [22] C.S. Rafferty, "Stress Effects in Silicon oxidation simulation and experiments", *Thèse de Doctorat soutenue à l'Université de Stanford, Etats-Unis*, (1989).
- [23] P.B. Griffin, C.S. Rafferty, "A Viscous Nitride Model for Nitride/Oxide Isolation Structures", *IEDM*, (1990), p. 741-744.
- [24] V. Senez, "Modélisation bi-dimensionnelle de l'oxydation du silicium: analyse viscoélastique de la relaxation des contraintes", *Thèse de Doctorat soutenue à l'Université de Lille*, (1995).

- [25] T.K. Yu, S.M. Kang, J. Sacks, W.J. Welch, "An Efficient Method for Parametric Yield Optimization of MOS Integrated Circuits", *Proc. IC-CAD*, (1989).
- [26] G.E.P. Box, N.R. Draper, "Empirical Model Building and response Surface", *New-York: Wiley*, (1987).
- [27] N. Draper, H. Smith Jr., "Applied Regression Analysis", *New-York: Wiley*, (1981).
- [28] E. Carniti, M. Cecchetti, "Ulysses, User's Guide, Version 2.0", *IMEC-STMicroelectronics, Belgique-France*, (06/1993).
- [29] SILVACO International, "Athena, User's Guide, Version 4.0.0", *Université de Stanford, Etats-Unis*, (10/1996).
- [30] G.P. Carnevale, "Studio e Simulazione del Processo di Isolamento per Circuiti Integrati a Scala di Integrazione Ultra-large", *Tesi soutenue à l'Université de Pavie, Italie*, (1995).
- [31] R.D. Snee, "Computed Aided Design of Experiment: Some Practical Experiences", *J. Quality Tech.*, **17**, no. 4, (Oct. 1985).
- [32] M. Stein, "Large Sample Properties of Simulations Using Latin Hypercube Sampling", *Technometrics*, **27**, no. 2, (May 1987).
- [33] L. Mylor, A. Sangiovanni Vincentelli, "Computing Parametric Yield Accurately and Efficiently", *Proc. ICCAM*, (1990).
- [34] P. Smeys, P.B. Griffin, K.C. Saraswat, "An Improved Calibration Methodology for Modeling Advanced Isolation Technologies", *SISDEP'95*, (1995), p. 741-744.
- [35] S.K. Jones, A. Poncet, I. De Wolf, M.M. Ahmed, W.J. Rothwell, "An Advanced Calibration Method for Modelling Oxidation and Mechanical Stress in Sub-micron CMOS Isolation Structures", *IEDM'94*, (1994), p. 877-880.
- [36] Projet Européen: ESPRIT-8002 ADEQUAT2, "Calibration of 2D Stress Models", *GEC Plessy Semiconductors, Northants, United Kindom*, (1995), p. 741-744.
- [37] ISE TCAD MANUALS "GENESISe, Release 4, Volume 1", *ISE Integrated Systems Engineering AG, Zurich, Suisse* (1995/97).

- [38] 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., USA, (1991).

Chapitre III

Etude de la structure NCLAD

Le développement de dispositifs de plus en plus petits (technologie CMOS $0.5 \mu m$ (1995), puis $0.35 \mu m$ (1997) et maintenant $0.25 \mu m$) nécessite de mettre au point des structures d'isolement de plus en plus compactes. La structure de base est le LOCOS (LOCAl Oxidation of Silicon) inventée par Kooi en 1970 [2]. Cependant cette structure, dans sa configuration minimale résiste mal aux opérations de compactage. En effet, pour des zones actives particulièrement étroites, le masque de nitrure perd son efficacité entraînant un "perçage" de l'oxyde, ou punch-through en anglais (Figure III.1). A contrario, pour des ouvertures de nitrure très faibles, on observe un amincissement de l'oxyde de champ (Figure III.1) réduisant l'efficacité de l'isolement électrique. Le résultat global est une perte des capacités d'isolation de la structure LOCOS traditionnelle.

Parmi les nouvelles structures d'isolement pour la technologie CMOS $0.35 \mu m$, un candidat intéressant est le Nitrure-Clad LOCOS (LOCOS NCLAD). Ce nom signifie "LOCOS revêtu de nitrure". En effet, le masque de nitrure du LOCOS est couvert d'une seconde couche de nitrure formant des sortes de "bouchons" aux bords inférieurs du masque. Ceux-ci diminuent l'oxydation latérale, et donc le bec d'oiseau, tout en conservant une épaisseur d'oxyde de champ suffisante. Le résultat est que les capacités d'isolation de cette structure sont largement équivalentes à celles du LOCOS avec l'avantage d'une structure plus compacte [8]. Enfin, l'application du concept "NCLAD" au LOCOS enterré est particulièrement prometteuse puisqu'elle permet également d'améliorer la planarité de la technologie.

L'efficacité des structures NCLAD résulte de l'amélioration du masque de nitrure, qui empêche l'oxydation latérale. Mais, comme le Si_3N_4 s'oxyde en présence d'oxydants, cette efficacité est fortement liée à la capacité du nitrure à résister à cette oxydation. L'étude par simulation de ce genre de

structures nécessite donc la modélisation du phénomène d'oxydation du nitrure de silicium.

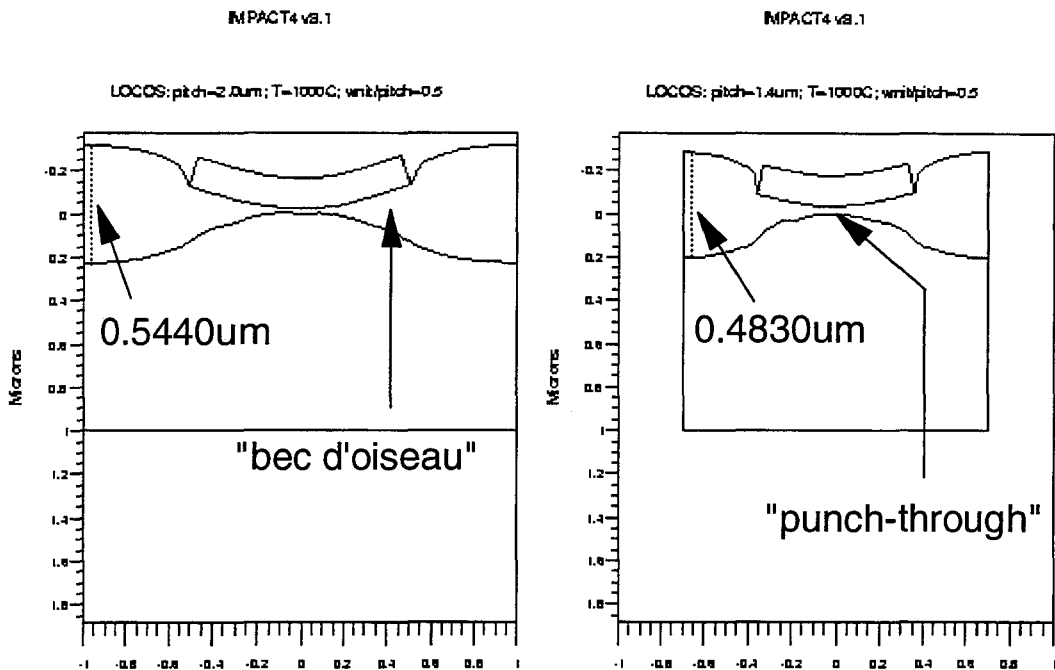


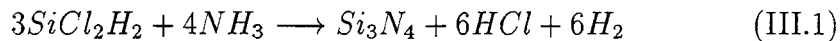
Figure III.1 – Simulation de deux LOCOS de pitches différents: $2.0 \mu\text{m}$ et $1.45 \mu\text{m}$, oxydés dans les mêmes conditions. Le rapport entre la largeur du nitrure et le pitch est de 0.5 pour les deux structures.

Cette modélisation est traitée dans ce chapitre. Nous décrirons tout d'abord les structures NCLAD et le mécanisme d'oxydation du Si_3N_4 . Puis nous passerons en revue les différents modèles qui peuvent être utilisés. Après avoir justifié le choix que nous avons effectué parmi ces modèles, nous détaillerons l'implantation numérique qui a été réalisée dans le programme de simulation IMPACT-4 [3]. Enfin, nous présenterons une application réalisée, à l'aide de ce travail, qui a consisté à étudier des structures LOCOS NCLAD enterrées ou non. Le but est de déterminer si les structures NCLAD sont susceptibles d'améliorer efficacement les structures d'isolement utilisées pour la génération CMOS $0.35 \mu\text{m}$. En particulier, nous avons analysé l'influence de la largeur du "bouchon" sur le profile du bec d'oiseau, pour différentes configurations du pitch et du nitrure.

III.1 Description des structures NCLAD

III.1.1 Dépôt du nitrure de silicium

L'intérêt du nitrure de silicium est sa quasi imperméabilité à l'humidité, sa lente vitesse d'oxydation et son utilité en tant que barrière contre la migration des ions sodiums (qui rendent le dispositif instable) à travers la multicouche d'interconnexion. C'est pourquoi, il est utilisé pour passiver les dispositifs microélectroniques et pour masquer les zones actives lors de l'oxydation sélective du silicium [4]. Le nitrure de silicium est généralement déposé par réaction chimique à haute température (entre 700°C et 900°C) et basse pression, c'est à dire par LPCVD (Dépôt en Phase Vapeur à Basse Pression). La réaction chimique s'effectue entre le dichlorosilane ($SiCl_2H_2$) et l'ammoniaque (NH_3) et est la suivante [4]:



La pression réduite permet d'obtenir une bonne planarité du film et une haute résistance à l'eau. L'énergie d'activation pour le dépôt du nitrure de silicium est d'environ 1.8eV (41 kcal/mole) [4]. C'est une valeur commune au dépôt d'autres matériaux, tel le polysilicium: 1.7eV (40kcal/mole).

Le film déposé est un amorphe diélectrique qui contient jusqu'à 8% d'atomes d'hydrogène. Ces hydrogènes sont liés en minorité au silicium et en majorité au nitrure par des liaisons covalentes, et peuvent favoriser la rupture des liaisons =N-Si, et donc l'oxydation du matériau [5]. Sa densité varie entre 2.8 et 3.1g/cm³, selon la température de préparation du film [6]. Plus la température est élevée, plus la densité est grande, car les hydrogènes incorporés pendant le dépôt sont désorbés plus facilement. Le nitrure de silicium ainsi déposé se trouve dans un état de contrainte tensile encore appelée contrainte intrinsèque, de l'ordre de $1.5 \cdot 10^{10}$ dynes/cm². Cet état de contrainte est parfois responsable du craquage du film, surtout lorsque son épaisseur devient conséquente ($\simeq 0.300 \mu m$) [4].

Dans notre cas, le nitrure de silicium a été déposé par LPCVD à 780°C pour une pression de 300 mTorr. Nous allons maintenant décrire les étapes technologiques de fabrication de la structure NCLAD puis le mécanisme et la cinétique d'oxydation du nitrure de silicium.

III.1.2 Fabrication de la structure NCLAD

L'efficacité des structures NCLAD réside dans la présence de deux "bouchons" de nitrure placés sous les bords du masque, à la place du piédestal

d'oxyde, empêchant la diffusion des agents oxydants sous le masque. Par cette diffusion ralentie, le bec d'oiseau est réduit et le perçage de la zone active est retardé.

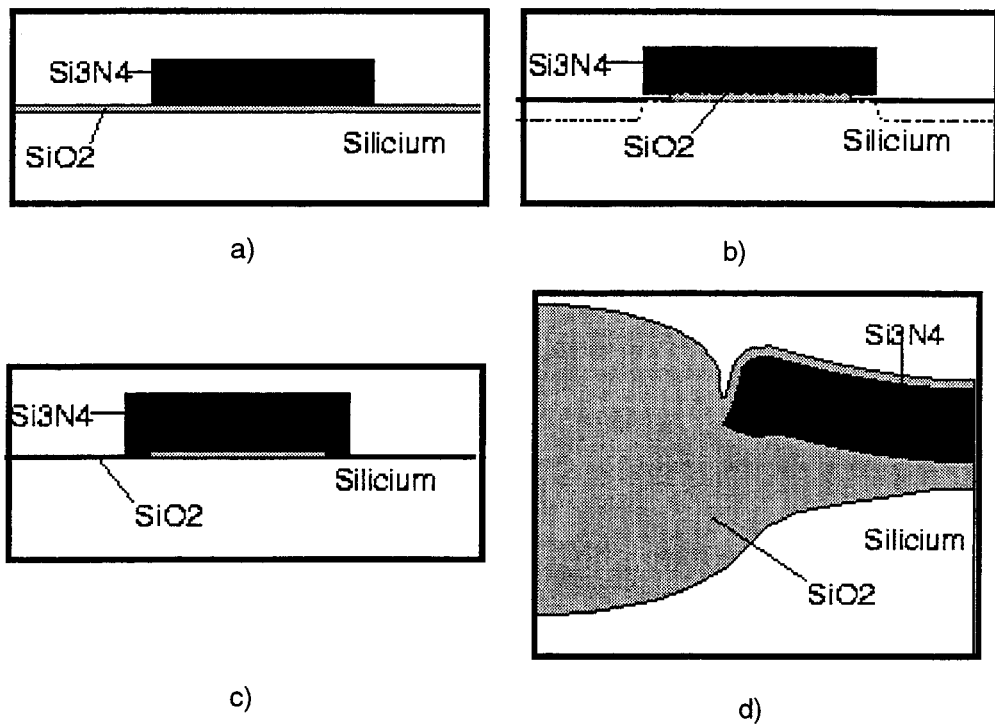


Figure III.2 – Procédé de fabrication des NCLAD: a) Masque de nitrure après dépôt et gravure de la première couche de Si_3N_4 ; b) Gravure du piédestal d'oxyde. Dans le cas d'une structure enterrée, une gravure du substrat, indiquée sur la figure par des pointillés, est ajoutée; c) Structure NCLAD après dépôt de la seconde couche de Si_3N_4 et avant oxydation; d) Structure NCLAD après oxydation.

Les étapes de la fabrication d'une structure NCLAD, prise comme exemple, fabriquée chez STMicroelectronics, sont détaillées dans ce qui suit:

- croissance thermique d'un piédestal d'oxyde de $0.020 \mu\text{m}$ d'épaisseur, à 920°C , en atmosphère sèche, sur l'ensemble de la tranche de silicium,
- dépôt par LPCVD d'une épaisseur de $0.160 \mu\text{m}$ de nitrure de silicium, dans les conditions détaillées au paragraphe III.1.1,

- gravure anisotropique par plasma du nitrure de silicium (Figure III.2 a)),
- gravure isotropique humide en HF du piédestal d'oxyde, de manière à créer deux cavités sous les bords du masque de nitrure de silicium, de l'ordre de $0.030 \mu\text{m}$ de long (Figure III.2 b)),
- si la structure est une structure enterrée, une étape de gravure est ajoutée pour consommer $0.050 \mu\text{m}$ d'épaisseur de silicium (Figure III.2 b), ligne en pointillés),
- courte réoxydation à 950°C , afin de ne pas effectuer le second dépôt de nitrure de silicium directement sur le substrat,
- dépôt de la seconde couche de nitrure de silicium, d'une épaisseur de $0.030 \mu\text{m}$ environ, afin de remplir complètement les cavités sous les bords du masque,
- gravure chimique du nitrure de silicium présent sur les zones de champ. On observe alors sur chaque masque, au niveau de chaque bord, des "bouchons" de nitrure qui emprisonnent le piédestal (Figure III.2 c)),
- l'oxydation de champ est enfin réalisée, en atmosphère humide, à 1050°C , pendant 110 minutes afin de faire croître un oxyde de $0.55 \mu\text{m}$ d'épaisseur finale (Figure III.2 d)).

Cependant, au cours de l'oxydation de champ, le silicium et le nitrure de silicium s'oxydent à des vitesses différentes (Figure III.2 d)). Ceci signifie que les "bouchons" de nitrure de silicium s'oxydent et tendent à disparaître. Il est donc nécessaire de trouver la largeur optimale de cavité telle que tout le "bouchon" de nitrure soit consommé à la fin de l'oxydation thermique de champ. En effet, une largeur trop petite, c'est à dire une gravure trop courte du piédestal, entraîne une consommation trop rapide du bouchon pour qu'il puisse influencer de manière efficace contre la diffusion d'oxydants sous le masque (Figure III.3 a)). En revanche, une largeur trop grande du "bouchon" risque d'empêcher sa consommation totale au cours de l'oxydation thermique de champ ce qui posera des problèmes lorsque l'on retirera le masque (Figure III.3 b)). On comprend maintenant tout l'intérêt d'un modèle prédictif d'oxydation du nitrure.

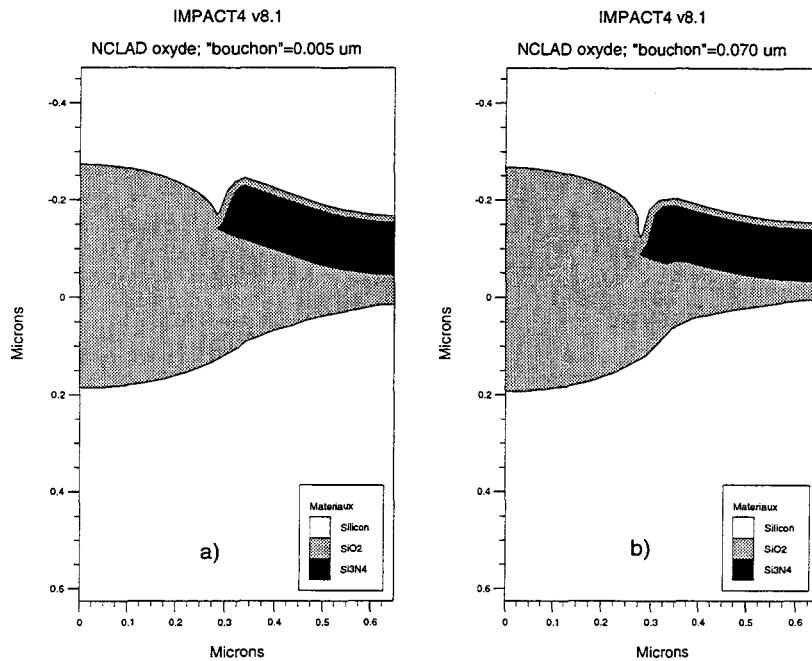


Figure III.3 – Comparaison entre deux structures NCLAD, ayant des largeurs de “bouchons”, respectivement de a) $0.005 \mu\text{m}$ et b) $0.070 \mu\text{m}$.

Nous allons dans la section suivante décrire le mécanisme et la cinétique d’oxydation du nitrure de silicium.

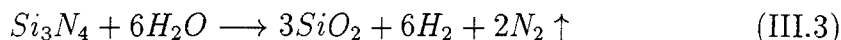
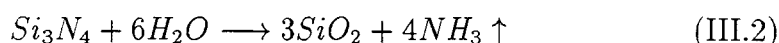
III.1.3 Mécanisme et cinétique d’oxydation du nitrure

a) Mécanisme d’oxydation

Le Si_3N_4 préparé par LPCVD s’oxyde aussi bien en milieu humide (en présence de H_2O) que sec (en présence de O_2). Comme pour le silicium, la réaction s’effectue beaucoup plus rapidement dans le cas d’une oxydation humide que dans le cas d’une oxydation sèche [5, 7, 8, 9]. Kuiper explique cette différence en attribuant aux atomes d’hydrogène un rôle essentiel dans le mécanisme de réaction. Ainsi d’après lui, l’oxydation du Si_3N_4 ne peut s’effectuer que si des hydrogènes sont présents, car ils agissent comme des sortes de catalyseurs de la réaction, en permettant la rupture des liaisons $\equiv\text{Si-N}=\text{}$, et donc la formation des liaisons $\equiv\text{Si-O}-$ [5]. En milieu humide, ce seraient les hydrogènes de H_2O qui agiraient. En milieu sec, ce seraient les hydrogènes incorporés dans le film de Si_3N_4 lors du dépôt (voir section III.1.1) qui permettraient ce mécanisme. Etant en bien plus faible quantité, ceci expliquerait la faible vitesse d’oxydation observée en présence de O_2 .

Les structures d'isolement ne s'oxydant qu'en milieu humide, nous n'avons étudié que l'oxydation du nitrure en présence de H_2O .

Les réactions chimiques globales possibles de l'oxydation du Si_3N_4 en présence de H_2O sont les suivantes, selon [10]:



La réaction la plus probable est décrite par l'équation (III.2). L'énergie d'activation de cette réaction a été calculée et est égale à 45kcal/mol [5].

Le mécanisme de l'oxydation du nitrure de silicium, d'après [5], s'effectue en quatre étapes (Figure III.4). Chaque liaison $=N-Si\equiv$ se rompt en présence d'une molécule d'eau, pour former $=N-H$ et $HOSi\equiv$. La première étape (Etape 1) est la plus lente. Puis plus les H se substituent aux Si (Etapes 2 et 3), plus la réaction est rapide. La présence des H liés aux N affaiblit les liaisons $=N-Si\equiv$ qui se rompent alors plus facilement [11]. Enfin, les $HOSi\equiv$ formés se condensent pour donner du SiO_2 (Etape 4).

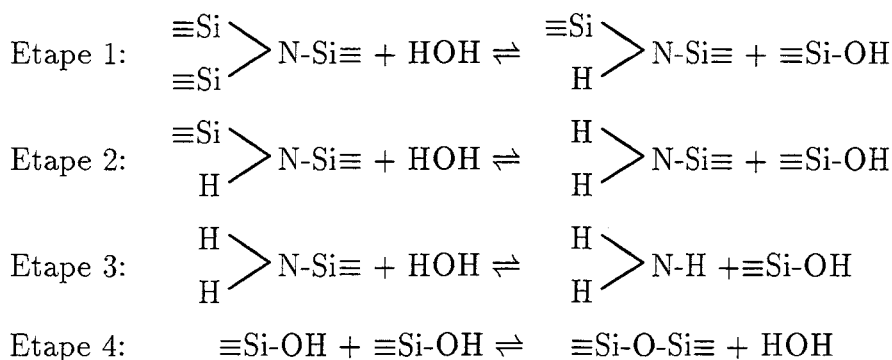


Figure III.4 – Mécanisme de l'oxydation du nitrure. Au cours des étapes 1 à 3, les liaisons $=N-Si\equiv$ se rompent les une après les autres, de plus en plus facilement, en présence de H_2O , pour former le produit NH_3 de l'étape 3. Enfin, dans l'étape 4, les $HOSi\equiv$ créés au cours des étapes précédentes réagissent pour former des liaisons $\equiv Si-O-Si\equiv$, qui sont celles présentes dans SiO_2 .

Les travaux de Kainaskii et Kooi viennent conforter cette théorie [12, 13]. En effet, le premier a observé que du NH_3 se dégage au cours de l'oxydation du nitrure de silicium en milieu humide. Le second a remarqué qu'une couche de Si_3N_4 se forme sous le masque de nitrure à l'interface SiO_2/Si au cours

de l'oxydation en milieu humide de structures LOCOS [13]. Il a expliqué ce phénomène par un dégagement gazeux de NH_3 , résultant de l'oxydation du nitrure, qui réagit ensuite avec le silicium pour former à nouveau du nitrure à l'interface Si/SiO_2 . De plus Kooi a également observé que ce phénomène ne se produisait pas en ambiance sèche, ce qui tend à confirmer la théorie de Kuiper [5] qui affirme l'importance de la présence des H pour qu'il y ait oxydation. On notera enfin que le mécanisme décrit ci-dessus possède de fortes analogies avec ceux décrits par Jorgensen [14] et par Han et Helms [15] à propos de l'oxydation du silicium.

b) Cinétique d'oxydation

Tout d'abord, comme pour l'oxydation du silicium, c'est l'oxydant qui diffuse à travers l'oxyde de silicium, formé sur le nitrure de silicium, jusqu'au substrat de nitrure. Ensuite, la réaction a lieu à l'interface SiO_2/Si_3N_4 . Un nouveau volume d'oxyde de silicium est créé impliquant une augmentation de volume du système oxyde/substrat. La consommation de nitrure déplace l'interface Si_3N_4/SiO_2 vers l'intérieur du substrat de nitrure, comme ceci est représenté sur la Figure III.5. Cette augmentation de volume résulte des différences de densité et poids moléculaire de l'oxyde et du nitrure de silicium.

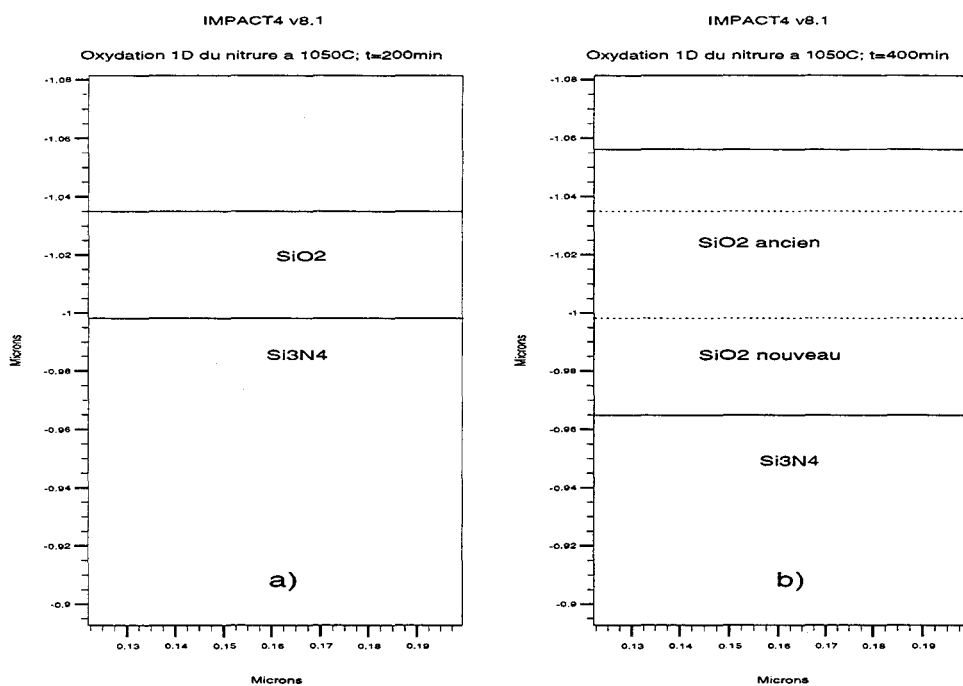


Figure III.5 – Oxydation 1D du Si_3N_4 , à $1050^\circ C$, pendant: a) 200min; b) 400min. Le volume de SiO_2 créé est plus important que celui de Si_3N_4 consommé.

En effet, la densité de l'oxyde de silicium est de 2.2 g/cm^3 tandis que celle du nitrure de silicium varie entre 2.8 et 3.1 g/cm^3 . On caractérise cette augmentation de volume par son taux de conversion CR qui correspond au rapport des volumes d'oxyde créé et de nitrure de silicium consommé. Ce paramètre est égal à 1.79 d'après nos propres données expérimentales [16], et varie entre 1.6 et 2 d'après la littérature [17, 8, 18]. Pour l'oxydation du silicium, le même paramètre a été calculé et est égale à 2.27 , ce qui est nettement plus important que pour le nitrure de silicium [19]. Enfin les produits gazeux formés au cours de la réaction, tels que NH_3 diffusent à contre-sens des molécules d'oxydant, au travers de la couche d'oxyde, jusqu'à l'interface oxyde/air.



On peut cependant ajouter que le fait que le nitrure s'oxyde plus lentement que le silicium (on l'a évalué à vingt fois plus lentement) est aussi lié à la complexité du mécanisme d'oxydation, nécessitant plusieurs étapes intermédiaires, à la force de la liaison $\equiv\text{Si-N}=\text{}$ qui est plus importante que celle de $\equiv\text{Si-Si}\equiv$ [5], et à la façon dont les produits NH_3 diffuse. Ceci sera plus largement développé dans le paragraphe suivant.

Nous allons maintenant décrire différents modèles d'oxydation du nitrure, et nous expliquerons plus en détail celui que nous avons choisi tout en justifiant ce choix.

III.2 Modélisation de l'oxydation du nitrure de silicium

La modélisation de l'oxydation du nitrure de silicium, déposé par LPCVD, a été peu étudiée dans la littérature. Deux modèles ont été relevés et étudiés. Ils sont applicables aux oxydations réalisées chez STMicroelectronics, puisque les mêmes conditions expérimentales sont utilisées: le Si_3N_4 est préparé par LPCVD et est oxydé en milieu humide pour des températures comprises entre 900 et 1100°C , à pression atmosphérique (1 atm). Le premier est un modèle empirique proposé par Kamins [17], pour des oxydations humides et sèches du nitrure. Le second, détaillé par Enomoto, suppose que les NH_3 produits de la réaction s'accumulent tout d'abord à l'interface, avant de diffuser, réduisant ainsi la vitesse d'oxydation [8]. Nous nous sommes inspirés de ce dernier modèle analytique pour extraire une modélisation numérique facilement intégrable dans IMPACT-4.

III.2.1 Définition des variables utilisées

Dans ce chapitre, les notations suivantes sont utilisées:

- x_{ox} = épaisseur du film d'oxyde croissant sur le silicium (μm),
- x_o = épaisseur du film d'oxyde croissant sur le nitrure (μm),
- x_n = épaisseur de nitrure consommé pendant l'oxydation (μm),
- $D_o^{(nit)}$ = coefficient de diffusion de l'oxydant au travers de l'oxyde croissant sur le nitrure ($\mu m^2/min$),
- $D_o^{(si)}$ = coefficient de diffusion de l'oxydant au travers de l'oxyde croissant sur le silicium ($\mu m^2/min$),
- D_n = coefficient de diffusion des produits ($NH_3...$) au travers de l'oxyde ($\mu m^2/min$),
- $C_o^{(s)}$ = $H.P_{H_2O}$: concentration de l'oxydant à la surface extérieure de l'oxyde croissant sur le nitrure (mol/cm^3),
- $C_o^{(i)}$ = concentration de l'oxydant à l'interface oxyde/nitrure (mol/cm^3),
- $C_n^{(i)}$ = concentration des produits à l'interface oxyde/nitrure (mol/cm^3),
- $C_n^{(s)}$ = concentration des produits à la surface extérieure de l'oxyde croissant sur le nitrure (mol/cm^3),
- $C_n(0)$ = concentration limite des produits à l'interface au delà de laquelle la constante de réaction k_n est réduite (mol/cm^3),
- C^* = concentration d'équilibre dans l'oxyde (mol/cm^3),
- k_s = constante de réaction du silicium avec l'oxydant ($\mu m/min$),
- k_n = constante de réaction du nitrure avec l'oxydant ($\mu m/min$),
- k'_n = constante de réaction du nitrure avec l'oxydant à faible concentration des produits ($\mu m/min$),
- P_{H_2O} = pression partielle d'espèces oxydantes (atm),
- T = température d'oxydation (K),
- t = temps d'oxydation (min),
- h = coefficient de transfert de masse de la phase gazeuse (mol/cm^3),
- N = nombre de molécules incorporées dans une unité de volume de la couche d'oxyde ($=4.4 \times 10^{+22} cm^{-3}$ pour l'oxydation humide),
- H = constante d'Henry ($=3 \times 10^{+19} cm^{-3}$),
- k = constante de Boltzman ($=1.38 \times 10^{-23} J/K$).

III.2.2 Modèle empirique de Kamins

En 1981, Kamins, recueillant un certain nombre de données expérimentales issues de la littérature [8, 20, 21] a analysé la dépendance en température, temps et pression de l'épaisseur d'oxyde de silicium croissant sur un substrat de Si_3N_4 [17].

Ces travaux ont permis de dériver le modèle analytique et empirique,

décrivant la variation de l'épaisseur d'oxyde de silicium du substrat Si_3N_4 en fonction de la température, de la pression et du temps d'oxydation, suivant l'équation (III.4):

$$x_o = 1.82 \cdot 10^7 \exp\left(\frac{-1.9}{kT}\right) t^{0.7} P_{H_2O} \quad (\text{III.4})$$

Le domaine de validité de ce modèle est le suivant: températures comprises entre 900°C et 1100°C; pressions comprises entre 1 et 10 *atm*.

Il a été implémenté dans le programme de simulation: SUPREM III [22]. Cependant, SUPREM-III est un programme mono-dimensionnel, alors que la simulation de structures d'isolement nécessite une simulation bi-dimensionnelle. En particulier, les phénomènes liés à l'augmentation de volume, engendrée par la réaction d'oxydation, se traduisant par la création de contraintes mécaniques, ne peuvent pas être pris en compte avec ce modèle. C'est pourquoi nous avons étudié un modèle plus complet qui est celui de Enomoto [8].

III.2.3 Modèle de Enomoto

Le modèle d'Enomoto est un modèle qui s'appuie sur la modélisation de Deal et Grove de l'oxydation du silicium [23]. Enomoto et al. ont utilisé l'ellipsométrie pour réaliser leurs expériences.

La manipulation fut la suivante:

- Dépôt du Si_3N_4 sur des plaques de silicium dopées n, orientées (111), par CVD (Dépôt en Phase Vapeur) de SiH_4 et NH_3 (99.99%), à une température de 820°C, avec l'azote comme support gazeux. Le rapport de flux de SiH_4 sur NH_3 est de 1:350. L'épaisseur de film déposé est en moyenne de 0.070 μm . Le réacteur utilisé est un réacteur horizontal.
- Densification des films par recuit à 1100°C, pendant trois heures, afin d'éviter une erreur dans la mesure des épaisseurs, après oxydation du film.
- Oxydation thermique de ces films dans une ambiance sèche ou humide à des températures variant entre 900°C et 1100°C, et des pressions variant entre 0.25 *atm* et 1 *atm*. Pour comparaison, les mêmes oxydations ont été effectuées pour des substrats de silicium.
- Mesure par ellipsométrie des épaisseurs: i) d'oxyde ayant crû sur le Si_3N_4 et ii) de Si_3N_4 restant après attaque complète de l'oxyde que l'on a fait croître.

L'ellipsométrie est une technique qui permet de calculer l'indice de réfraction et l'épaisseur d'un film déposé sur un substrat. Ces mesures ont été effectuées à l'aide d'un faisceau généré par une source laser He-Ne (longueur d'onde de 546.1 nm). Avec cette technique, on obtient une incertitude sur la mesure de $\pm 0.01 \mu m$. Or, les caractéristiques du faisceau réfracté varient en fonction de l'épaisseur du film [18]. Des courbes, sortes d'abaques, reliant les paramètres attribués au faisceau diffracté et l'épaisseur du film ont été préalablement tracées. C'est à partir de ces courbes d'ellipsométrie que les épaisseurs des films que l'on cherche à mesurer peuvent être déduites [24].

Une des différences principales entre l'oxydation de Si_3N_4 et celle de Si est la génération d'ammoniaque NH_3 , qui s'accumule à l'interface SiO_2/Si_3N_4 avant de diffuser, alors que les H_2 produits lors de l'oxydation du silicium diffusent tout de suite au travers de l'oxyde en croissance.

Enomoto considère que non seulement la vitesse de réaction à l'interface SiO_2/Si_3N_4 est proportionnelle à la concentration d'oxydants atteignant cette interface $C_o^{(i)}$, mais qu'elle est aussi influencée par la concentration en NH_3 , à cette même interface, $C_n^{(i)}$. Si cette concentration dépasse la valeur critique $C_n(0)$, alors on considère que la vitesse de réaction est inversement proportionnelle à $C_n^{(i)}$.

Dans le modèle de Deal et Grove on définit trois flux (F_1, F_2, F_3 , schématisés sur la Figure III.6.

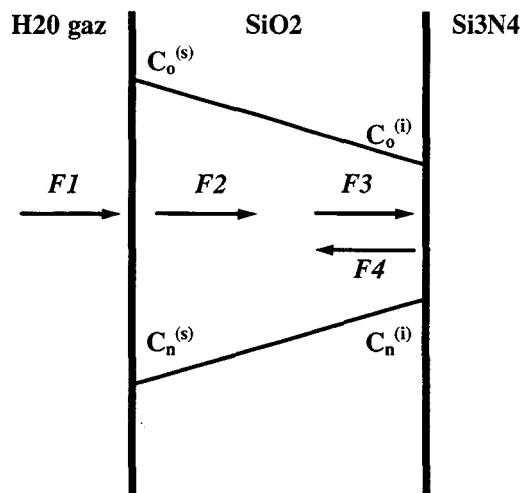


Figure III.6 – Modèle d'oxydation du Si_3N_4 , d'après Enomoto [8]. F_4 est le flux des produits qui vont en contre-sens des espèces oxydantes.

Les trois flux F_1, F_2, F_3 sont définis ainsi:

- Les espèces oxydantes sont transportées du corps de la phase gazeuse jusqu'à l'interface gaz-oxyde. Ce transport est défini par le flux F_1 . Il se calcule en appliquant la loi d'Henry avec la loi des gaz parfaits [25]:

$$F_1 = h(C^* - C_o^{(s)}) \quad (\text{III.5})$$

- Ces espèces diffusent ensuite au travers de la couche existante d'oxyde, vers le substrat. Cette diffusion est définie par le flux F_2 . Il suit la loi de Fick en tout point de l'épaisseur de l'oxyde:

$$F_2 = \frac{D_o^{(nit)}(C_o^{(s)} - C_o^{(i)})}{x_o} = 2N \frac{dx_o}{dt} \quad (\text{III.6})$$

- Enfin, elles réagissent à l'interface SiO_2/Si_3N_4 avec le nitrure de silicium. Cette réaction est définie par le flux F_3 . Si on suppose qu'il est proportionnel à $C_o^{(i)}$:

$$F_3 = 4k_n C_o^{(i)} \quad (\text{III.7})$$

Enomoto considère donc l'existence d'un quatrième flux (F_4) correspondant au flux des produits qui vont en contre-sens des espèces oxydantes. Lorsque l'état stationnaire de la réaction est atteint, c'est à dire rapidement, alors $F_1 = F_2 = F_3 = F_4$. Les flux d'oxydants (F_2) et de produits (F_4) s'expriment donc selon les équations (III.8) et (III.9):

$$F_2 = \frac{D_o^{(nit)}(C_o^{(s)} - C_o^{(i)})}{x_o} = 6k_n C_o^{(i)} = 2N \frac{dx_o}{dt}, \quad (\text{III.8})$$

$$F_4 = F_3 = \frac{D_n(C_n^{(i)} - C_n^{(s)})}{x_o} \approx \frac{D_n C_n^{(i)}}{x_o} = 4k_n C_o^{(i)} \quad (\text{III.9})$$

avec:

$$k_n = k'_n \quad \text{si } C_n^{(i)} \leq C_n(0) \quad (\text{III.10})$$

$$k_n = k'_n \left(\frac{C_n(0)}{C_n^{(i)}} \right) \quad \text{si } C_n^{(i)} > C_n(0) \quad (\text{III.11})$$

La concentration de NH_3 à la surface de l'oxyde, $C_n^{(s)}$, peut être négligée, car le NH_3 n'est pas introduit intentionnellement dans le milieu. C'est pourquoi l'équation (III.9) peut se simplifier. L'oxydation du nitrure de silicium présente alors trois types de régimes:

- temps d'oxydation t très petit: $C_n^{(i)} \leq C_n(0)$:

Le flux de NH_3 est négligeable, si bien que l'on ne tient compte que de l'équation (III.8), qui s'exprime ainsi:

$$x_o = \frac{3k_n C_o^{(s)}}{N} t \quad \text{pour } t \text{ faible, où } x_o \ll \frac{D_o^{(nit)}}{3k_n} \quad (\text{III.12})$$

Nous retrouvons le modèle de Deal et Grove, pour l'oxydation du silicium, appliqué au nitrure de silicium.

- temps d'oxydation t plus grand: $C_n^{(i)} \geq C_n(0)$:

Le flux de NH_3 n'est plus négligeable, si bien que l'épaisseur d'oxyde croissant sur le nitrure est déduite des équations (III.8) et (III.9):

$$\frac{dx_o}{dt} = \frac{9k_n D_n C_n(0)}{4N D_o^{(nit)}} \left[\left(1 + \frac{4C_o^{(s)} (D_o^{(nit)})^2}{9k_n D_n C_n(0) x_o} \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (\text{III.13})$$

A ce niveau, deux cas se présentent:

1. si l'épaisseur d'oxyde est encore faible, alors nous avons:

$x_o \ll 4C_o^{(s)} (D_o^{(nit)})^2 / (9k_n D_n C_n(0))$, et l'équation (III.13) s'écrit:

$$\frac{dx_o}{dt} = \left(\frac{9k_n' D_n C_n(0) C_o^{(s)}}{4N^2} \right)^{1/2} \cdot x_o^{-1/2} \quad (\text{III.14})$$

$$\Rightarrow x_o = \left(\frac{81k_n D_n C_n(0) C_o^{(s)}}{16N^2} \right)^{1/3} \cdot t^{2/3} \quad (\text{III.15})$$

2. si l'épaisseur d'oxyde est grande, alors nous avons:

$x_o \gg 4C_o^{(s)} (D_o^{(nit)})^2 / (9k_n D_n C_n(0))$, et l'équation (III.13) s'écrit:

$$\frac{dx_o}{dt} = \frac{C_o^{(s)} D_o^{(nit)}}{2N} \cdot \frac{1}{x_o} \quad (\text{III.16})$$

$$\Rightarrow x_o = \left(\frac{C_o^{(s)} D_o^{(nit)}}{N} \right)^{1/2} \cdot t^{1/2} \quad (\text{III.17})$$

Cette dernière équation est celle du modèle de Deal et Grove appliquée à des temps d'oxydation longs.

Au début de l'oxydation, le peu de NH_3 produit n'influence pas la vitesse de réaction: le flux correspondant est négligé. Comme dans le cas du silicium, la réaction est limitée par la constante de réaction k_n , et suit alors, comme indiqué dans l'équation (III.12), une loi linéaire: $x_o \propto t$. Puis, l'oxydation se poursuivant, F_4 croît, et n'est plus négligeable. Si l'épaisseur d'oxyde est

encore faible, alors l'équation modélisant l'oxydation est l'équation (III.15), qui est fonction de la contre-diffusion D_n , de la constante de réaction k_n et de la concentration critique $C_n(0)$ des produits NH_3 . Pour ce régime "intermédiaire", nous avons $x_o \propto t^{2/3}$. Enfin, lorsque l'épaisseur de l'oxyde devient grande, la réaction devient limitée par la diffusion d'oxydants au travers de l'oxyde, comme pour le silicium. La loi décrivant ce régime est la loi parabolique du modèle de Deal et Grove, équation (III.17), avec: $x_o \propto t^{1/2}$.

Chez STMicroelectronics, des oxydations à 950°C et 1000°C de films de nitrure, déposés par LPCVD ont été réalisées. Les graphes de la Figure III.7 représentent la cinétique d'oxydation de ces films [16]. Pour nos expériences, nous obtenons une dépendance en $t^{0.68}$ à 950°C et $t^{0.72}$ à 1000°C, valeurs qui sont quasiment celles déduites par Enomoto. Enfin, les taux de conversion (CR) déduits pour nos expériences et celles d'Enomoto, respectivement égaux à 1.79 et 1.64, sont en accord avec ce modèle.

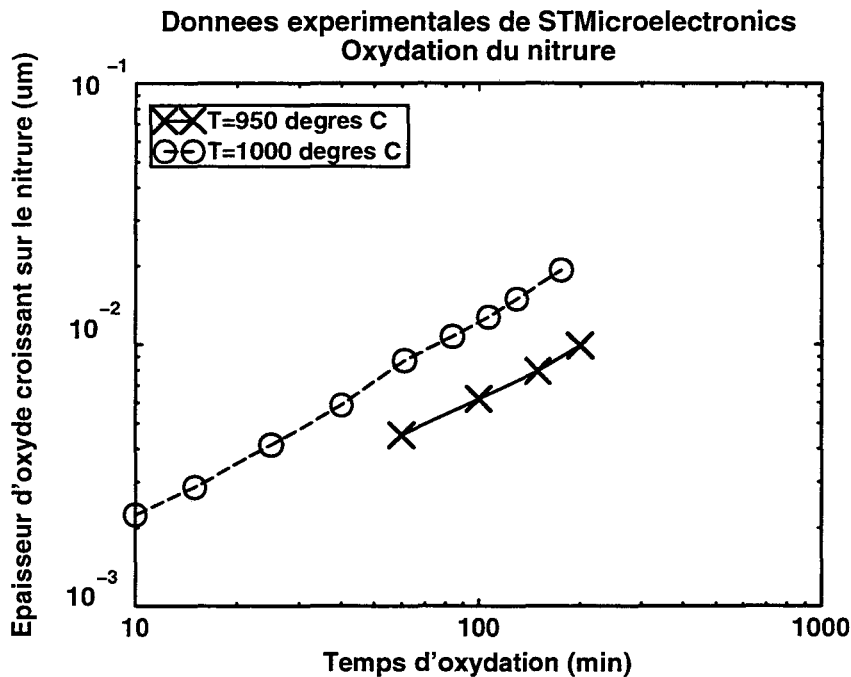


Figure III.7 – Résultats de l'oxydation du nitrure de STMicroelectronics [16]. L'épaisseur d'oxyde croissant sur le nitrure est exprimée en fonction du temps d'oxydation.

En conclusion, le modèle d'Enomoto reproduit correctement nos données expérimentales. Cependant, le nombre élevé de paramètres inconnus concernant le NH_3 (D_n , k_n et $C_n(0)$) rend son implantation et sa calibration mal aisée. C'est pourquoi nous nous sommes intéressés au modèle de Deal et

Grove, qui est en fait une restriction de celui d'Enomoto. Cette simplification est justifiée dans notre cas puisque l'on considère des oxydations longues à haute température, pour lesquelles l'épaisseur d'oxyde en croissance est grande. C'est ce que nous montrons dans la section suivante.

III.2.4 Modèle de Deal et Grove

Nous avons vu plus haut que l'oxydation du nitrure de silicium s'effectue macroscopiquement de la même manière que pour le silicium: la réaction a lieu à l'interface SiO_2/Si_3N_4 , par la formation d'un nouveau volume d'oxyde de silicium à partir de molécules d'oxydants et d'atomes de silicium. C'est un modèle qui suppose que la vitesse de réaction soit contrôlée autant par la diffusion de l'oxydant au travers de l'oxyde de silicium que par le coefficient de réaction à l'interface.

L'oxydation du nitrure de silicium, modélisée suivant Deal et Grove, peut se représenter suivant la Figure III.6, en supposant F_4 nul.

Il faut préciser que bien que l'on ne tienne pas compte du flux inverse F_4 des produits NH_3 , l'influence des NH_3 est malgré tout prise en compte dans le calcul des flux F_2 et F_3 . C'est à dire que ces flux représentent dans notre modèle des flux globaux. Le flux F_2 représente le flux dû à la diffusion des oxydants au travers de l'oxyde, comme pour le modèle de Deal et Grove appliqué au silicium, mais réduit par l'accumulation à l'interface SiO_2/Si_3N_4 des produits NH_3 avant de diffuser, et par leur contre-diffusion. En effet leur contre-diffusion est lente, et des molécules de NH_3 s'accumulent à l'interface SiO_2/Si_3N_4 , gênant l'arrivée des molécules d'oxydants, réduisant à l'interface la diffusion des agents oxydants [26]. Ceci signifie que le coefficient de diffusion calculé est un coefficient global correspondant à celui des oxydants, mais *réduit* par la présence des produits s'accumulant à l'interface SiO_2/Si_3N_4 et diffusant en sens inverse. C'est pourquoi, le coefficient de diffusion calculé par notre modèle est approximativement 100 fois plus faible que celui calculé pour l'oxydation du silicium, car il ne correspond par exclusivement à la diffusion des oxydants dans l'oxyde. De même, le flux F_3 correspond au flux des oxydants consommés. Par rapport à l'oxydation du silicium, il est réduit: i) à cause de la plus grande complexité de la réaction (elle s'effectue en plusieurs étapes intermédiaires); ii) à cause de la force de la liaison $\equiv Si-N=$ qui est plus importante que celle de $\equiv Si-Si\equiv$, et donc plus difficile à rompre [5]; iii) à cause de la présence des NH_3 . La réduction de F_3 explique la raison pour laquelle le coefficient de réaction à l'interface est là aussi réduit par 100, par rapport à celui du silicium, d'après nos calculs.

Lorsque l'on atteint l'état d'équilibre de la réaction, alors les trois flux sont égaux ($F_1 = F_2 = F_3$). Avec cet état d'équilibre, l'épaisseur x_o du SiO_2 en croissance au dessus du substrat de Si_3N_4 peut être déduite par l'équation (III.18):

$$\frac{x_o^2}{B} + \frac{x_o}{B/A} = t + \tau \quad (III.18)$$

avec B/A et B qui sont respectivement les constantes linéaire et parabolique; τ est le déplacement en temps nécessaire pour tenir compte de l'épaisseur x_i de la couche initiale d'oxyde présente à $t=0$ sur le nitrure de silicium. Contrairement au silicium, cette épaisseur initiale est tellement faible qu'elle peut être négligée: $\tau=0$.

Les constantes B/A et B sont fonction des paramètres du modèle utilisé:

$$\frac{B}{A} = \frac{3k_n C_o^{(s)}}{N} = \frac{3k_n H P_{H_2O}}{N} \quad (III.19)$$

$$B = \frac{D_o^{(nit)} C_o^{(s)}}{N} = \frac{D_o^{(nit)} H P_{H_2O}}{N} \quad (III.20)$$

Nous avons calculé B et B/A à partir de données expérimentales issues de mesures effectuées au sein de STMicroelectronics (Figure III.7) et de celles obtenues par Enomoto pour 1 atm [16, 8]. Les résultats sont rassemblés dans le tableau III.1.

Température (°C)	A (μm)	B ($\mu m^2/min$)	B/A ($\mu m/min$)
900	0.020	$0.54 \cdot 10^{-6}$	$2.45 \cdot 10^{-5}$
950	0.024	$1.98 \cdot 10^{-6}$	$8.25 \cdot 10^{-5}$
1000	0.027	$4.98 \cdot 10^{-6}$	$18.4 \cdot 10^{-5}$
1050	0.030	$12 \cdot 10^{-6}$	$40 \cdot 10^{-5}$
1100	0.033	$27 \cdot 10^{-6}$	$81.8 \cdot 10^{-5}$

Tableau III.1 – Evolution des paramètres A et B avec la température pour une oxydation humide du nitrure de silicium à $P_{H_2O}=1 atm$.

Ces mêmes paramètres ont été calculés pour des pressions différentes de 1 atm, à 1100°C, et sont donnés dans le tableau III.2.

A partir de ces valeurs, nous en avons déduit deux lois d'Arrhénius qui permettent d'exprimer B et B/A en fonction de la température d'oxydation et de la pression du milieu:

$$B = 1.96 \cdot 10^{+5} P_{H_2O}^{(0.8)} \exp\left(\frac{-2.68}{kT}\right) (\mu^2/min) \quad (III.21)$$

$$B/A = 5.29 \cdot 10^{+5} P_{H_2O}^{(0.8)} \exp\left(\frac{-2.39}{kT}\right) (\mu/min) \quad (III.22)$$

Pression	A	B
0.95 atm	0.033 μm	$27 \cdot 10^{-6} \mu m^2/min$
0.50 atm	0.033 μm	$18 \cdot 10^{-6} \mu m^2/min$
0.25 atm	0.033 μm	$10.2 \cdot 10^{-6} \mu m^2/min$

Tableau III.2 – Evolution des paramètres A et B avec la pression pour une oxydation humide du nitrure de silicium à 1100°C [8].

Sur les Figures III.8 à III.10, les courbes analytiques $x_o = f(t)$ du modèle de Deal et Grove sont confrontées aux mesures expérimentales issues des travaux de Enomoto et de ceux de STMicroelectronics. Elles montrent un bon accord. Les courbes empiriques du modèle de Kamins sont elles aussi représentées: elles s'écartent de plus en plus des points expérimentaux, lorsque la température augmente.

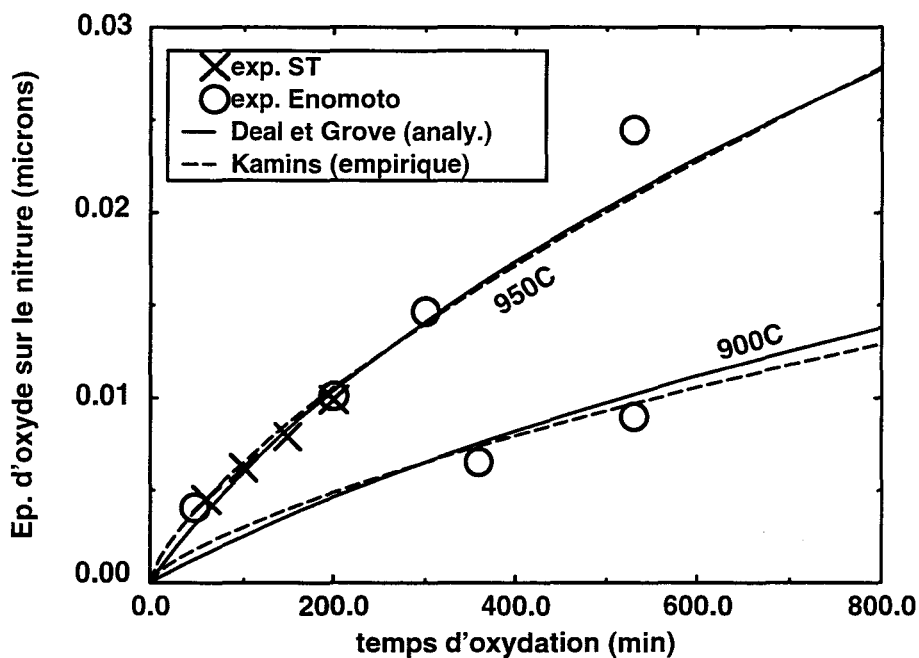


Figure III.8 – Confrontation des résultats expérimentaux de Enomoto et de STMicroelectronics, du modèle empirique de Kamins et du modèle analytique de Deal et Grove modifié, pour une oxydation du Si_3N_4 à 900°C et 950°C, $P_{H_2O} = 1 atm$.

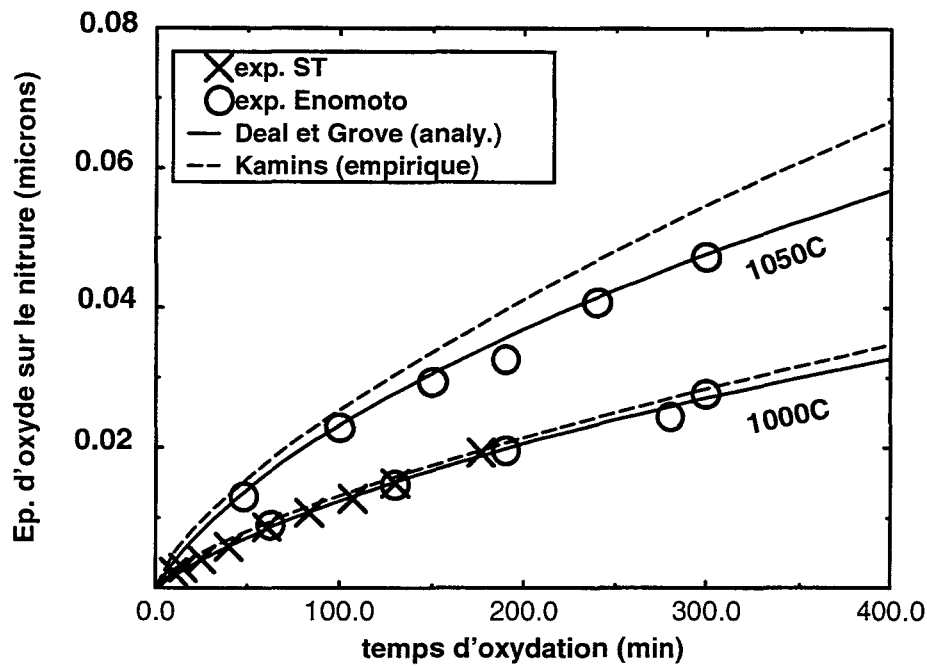


Figure III.9 – Confrontation des résultats expérimentaux de Enomoto et de STMicroelectronics, du modèle empirique de Kamins et du modèle analytique de Deal et Grove modifié, pour une oxydation du Si_3N_4 à $1000^\circ C$ et $1050^\circ C$, $P_{H_2O} = 1atm$.

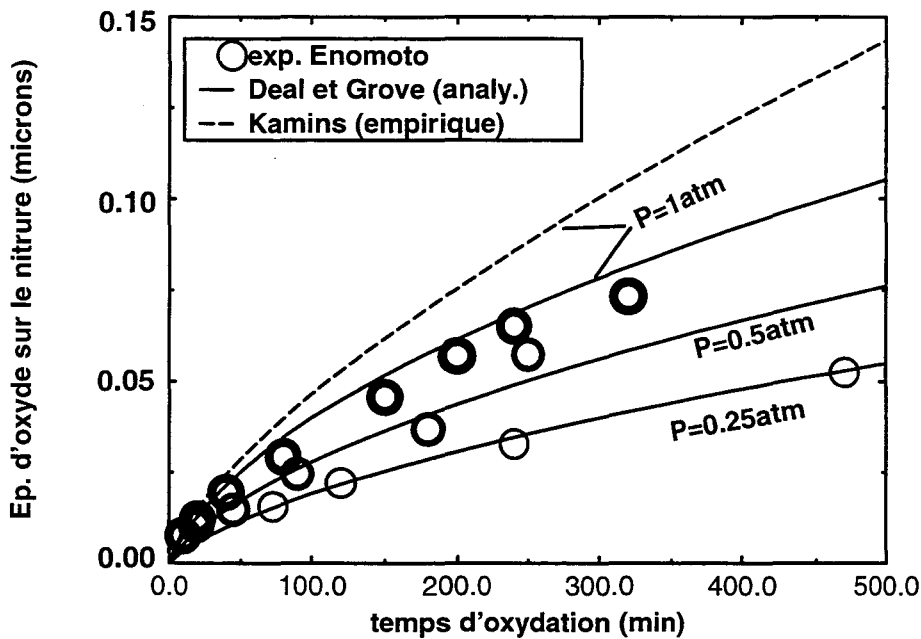


Figure III.10 – Confrontation des résultats expérimentaux de Enomoto et de STMicroelectronics, du modèle empirique de Kamins et du modèle analytique de Deal et Grove modifié, pour une oxydation du Si_3N_4 à $1100^\circ C$, $P_{H_2O} = 1atm/0.5atm/0.25atm$.

On constate que le modèle de Deal et Grove, modifié pour l'oxydation du nitrure de silicium, reproduit assez correctement les résultats expérimentaux. De plus il a l'avantage d'être plus simple que celui d'Enomoto et donc son implantation dans un simulateur numérique de technologie est plus aisée. C'est ce que nous allons voir dans le paragraphe suivant.

III.3 Implantation du modèle de Deal et Grove, pour l'oxydation du Si_3N_4

La difficulté lors de l'implantation du modèle d'oxydation du nitrure de silicium dans IMPACT-4 est liée au fait que sur une même structure d'isolement, deux matériaux différents (Si_3N_4 et Si) s'oxydent suivant deux modèles d'oxydation différents. Jusqu'à présent, l'oxydation simultanée de deux matériaux différents avait déjà été traitée dans le cas des structures PBL (silicium et polysilicium). Il n'y avait alors aucune difficulté et il suffisait d'affecter le bon coefficient de réaction en fonction du type de matériau oxydé.

Dans le cas présent, les modèles sont différents, et surtout, les coefficients de diffusion sont différents, suivant qu'il s'agit de l'oxyde en croissance sur le silicium ou sur le nitrure. Une solution serait de définir dans le simulateur deux oxydes différents (celui provenant de l'oxydation du Si_3N_4 , et celui provenant du Si). Ainsi, selon le "type" d'oxyde formé, le coefficient de diffusion correspondant serait attribué. Mais ceci n'a aucun fondement physique et entraînerait des problèmes numériques complexes, telle que la fusion des deux oxydes en croissance. Nous avons donc opté pour la solution d'un oxyde unique dans lequel la discrétisation numérique permet de distinguer deux coefficients de diffusion.

Nous exposons donc dans la section suivante les grandes lignes de cette implantation numérique.

III.3.1 Technique de calcul numérique dans IMPACT4

La simulation dans IMPACT-4 [3] est fondée sur une discrétisation par éléments finis (FEM) qui permet de traiter des géométries quelconques. Les structures étudiées sont résolues par un maillage très fin, afin d'obtenir une bonne précision sur le calcul de leur géométrie. Pendant l'étape d'oxydation, la géométrie et la topographie sont modifiés par la croissance du nouvel oxyde et la consommation du matériau oxydé, ce qui complique énormément la gestion du maillage. La technique la plus efficace, qui évite de trop augmenter le nombre de noeuds dans le nouveau domaine, est le remaillage de la structure

à chaque pas de calcul. Des éléments simples, de forme triangulaire, à trois noeuds sont choisis pour le maillage, afin d'avoir des temps de calcul raisonnables et d'augmenter la stabilité numérique. La modification de la géométrie et donc du maillage à chaque pas de temps nécessite une régénération de la structure.

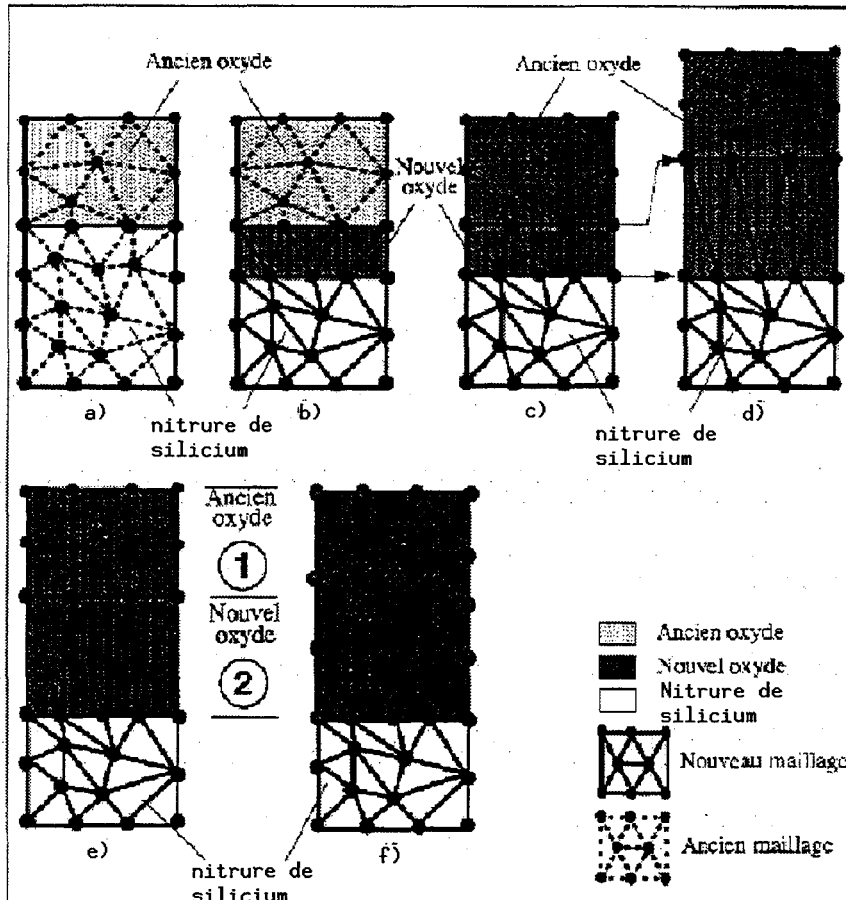


Figure III.11 – Regénération de la géométrie au cours d'une étape d'oxydation: cas du modèle complet [27].

La régénération de la géométrie s'effectue en quatre étapes, dans le cas de la modélisation complète. Elles sont décrites sur la Figure III.11.

1. a) et b): l'épaisseur de la couche de Si_3N_4 consommée est calculée à partir du résultat de la diffusion des agents oxydants. Ceci permet de définir une couche dite de "nouvel oxyde" qui est remaillé. Le remaillage du substrat (Si_3N_4) est automatiquement effectué, et les concentrations en impuretés ainsi que les contraintes sont interpolées. Le problème mécanique est alors résolu.

2. c): lorsque la convergence globale sur les déplacements est obtenue, alors les deux domaines d'oxyde ("ancien" et "nouveau") sont réunis. Puis les contraintes générées pendant ce pas de temps et ainsi que les contraintes résiduelles des pas précédents sont calculées pour l'ensemble des matériaux.
3. d): les nouvelles coordonnées de l'ensemble des noeuds de la structure sont alors déterminées en fonction du champ de déplacement calculé et la géométrie est modifiée.
4. e) et f): l'oxyde est remaillé. Les contraintes dans l'oxyde sont interpolées linéairement sur l'ancien maillage déplacé suivant la procédure illustrée sur la Figure III.11.

La régénération de la structure nécessite l'utilisation de deux procédures de: i) maillage de la structure, ii) résolution numérique des équations régissant l'oxydation:

– **le maillage:** Dans IMPACT-4, chaque matériau est défini par une enveloppe, déterminée par une suite de points, espacés par un pas de maillage de référence [27]. C'est à partir de ces points, noeuds du maillage "éléments finis", que la triangulation est systématiquement réalisée, en trois étapes, à l'aide du mailleur MSHPTS, développé à l'INRIA [28]:

1. une grille de points est superposée aux noeuds définissant l'enveloppe du domaine,
2. la triangulation est effectuée selon le critère de Delaunay [28],
3. une procédure itérative de régularisation est appliquée aux coordonnées des noeuds intérieurs au domaine.

Un schéma synthétisant ces étapes est présenté sur la Figure III.12.

Les domaines étant traités séparément, les noeuds situés aux interfaces sont doubles. Un seul maillage est utilisé pour le calcul: i) des impuretés et des concentrations en défauts, ii) de la concentration en oxydants, iii) des déplacements et des déformations des matériaux et iv) des contraintes.

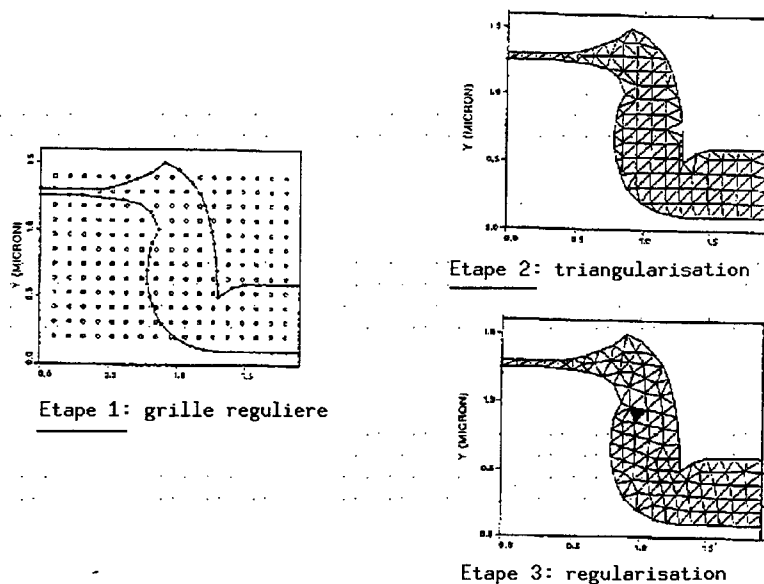


Figure III.12 – Etapes permettant le maillage d'un domaine dans IMPACT-4: 1: une grille de points est superposée aux noeuds définissant l'enveloppe du domaine; 2: la triangulation est effectuée avec le critère de Delaunay; 3: une procédure itérative de régularisation est appliquée aux coordonnées des noeuds intérieurs au domaine.

- **la résolution numérique:** L'oxydation dans un système bi-dimensionnel nécessite de résoudre: i) l'équation de Laplace à coefficients non constants (équation (II.11), Chapitre II), afin de calculer les concentrations en agents oxydants présents dans la silice, et ii) les équations d'équilibre mécanique issues de la relation fondamentale de la dynamique.

Ces équations différentielles sont discrétisées par la méthode des éléments finis sur des éléments triangulaires auxquels on affecte des fonctions de forme linéaires. L'assemblage "élément fini" est réalisé par la méthode de Galerkin avec une technique de résidus pondérés. Dans le cas des équations d'équilibre mécanique, les non-linéarités sont traitées par une méthode originale de sous-relaxation "dynamique" [29]. Enfin, le système linéaire qui en résulte est inversé par une méthode de Gauss. Cette dernière étape est précédée d'une renumérotation des noeuds qui permet de minimiser la largeur de bande et le profil de la matrice à inverser [30].

Une fois la convergence obtenue, il est possible de calculer les contraintes mécaniques dans chaque matériau et de mettre à jour le maillage.

III.3.2 Implantation du modèle d'oxydation du Si_3N_4 dans IMPACT-4

Comme il a été expliqué plus haut, la difficulté de l'implantation réside dans la différence entre les coefficients de diffusion, calculés à partir des paramètres linéaire (B/A) et parabolique (B), des modèles d'oxydation du silicium et du nitrure de silicium. Les coefficients de diffusion et les constantes de réaction pour les deux matériaux sont définis par les équations (III.23) à (III.26).

$$\text{Si}_3\text{N}_4 \quad D_o^{(nit)} = 1.43 \cdot 10^{+8} P_{\text{H}_2\text{O}}^{0.8} \exp(-2.68/kT) \quad (\mu^2/\text{min}) \quad (\text{III.23})$$

$$k_n = 1.29 \cdot 10^{+8} \exp(-2.39/kT) \quad (\mu/\text{min}) \quad (\text{III.24})$$

$$\text{Si} \quad D_o^{(si)} = 2.57 \cdot 10^{+3} P_{\text{H}_2\text{O}} \exp(-0.78/kT) \quad (\mu^2/\text{min}) \quad (\text{III.25})$$

$$k_s = 8.6 \cdot 10^{+8} \exp(-2.05/kT) \quad (\mu/\text{min}) \quad (\text{III.26})$$

Si la simulation est mono-dimensionnelle, c'est à dire qu'un seul matériau s'oxyde, alors, il n'est pas nécessaire de différencier l'oxyde issu du silicium de celui issu du nitrure. Il suffit de reconnaître le matériau qui s'oxyde pour attribuer les bons coefficients et le bon modèle (Figure III.13 a)).

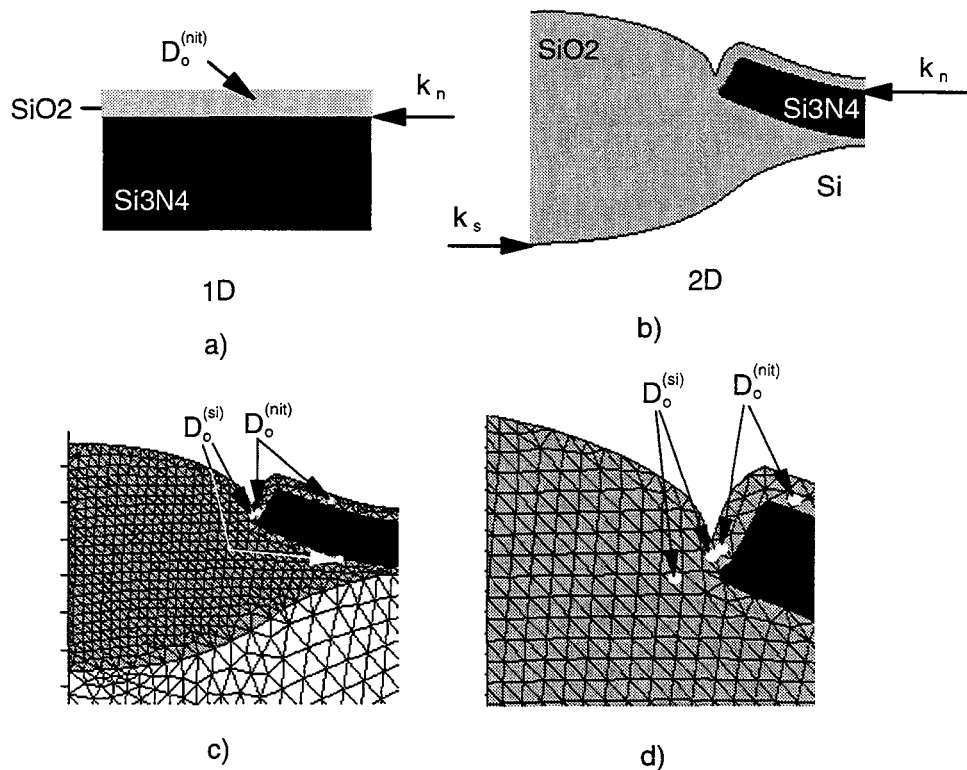


Figure III.13 – Attribution des coefficients de diffusion et de réaction pour le silicium et le Si_3N_4 : a) cas 1D; b) cas 2D, attribution de k_n et k_s ; c) cas 2D, attribution de $D_o^{(si)}$ et $D_o^{(nit)}$, selon le test schématisé dans d).

Si la simulation est bi-dimensionnelle, alors il faut trouver une méthode pour attribuer les coefficients de diffusion. Nous considérons un unique oxyde, défini par ses caractéristiques mécaniques. L'attribution de la constante de réaction k_n ou k_s est simple: il suffit de reconnaître le matériau qui s'oxyde à l'interface (Figure III.13 b)).

L'attribution du coefficient de diffusion est plus complexe car elle nécessite de connaître le volume d'oxyde issue du nitrure où des produits de la réaction ($\text{NH}_3\dots$) sont susceptibles d'exister et donc de modifier le coefficient de diffusion. Cette distinction s'effectue par un test numérique portant sur le "voisinage" de chaque élément de l'oxyde (Figure III.13 c) et d)):

- si chaque élément et chacun de ses voisins a au moins un noeud en contact avec un élément nitrure ou un noeud en contact avec l'air, alors cet élément est de l'oxyde contenant des produits de la réaction d'oxydation de Si_3N_4 (NH_3).
- dans le cas contraire, il est de l'oxyde issu de l'oxydation du silicium.

III.3.3 Limites de l'implantation

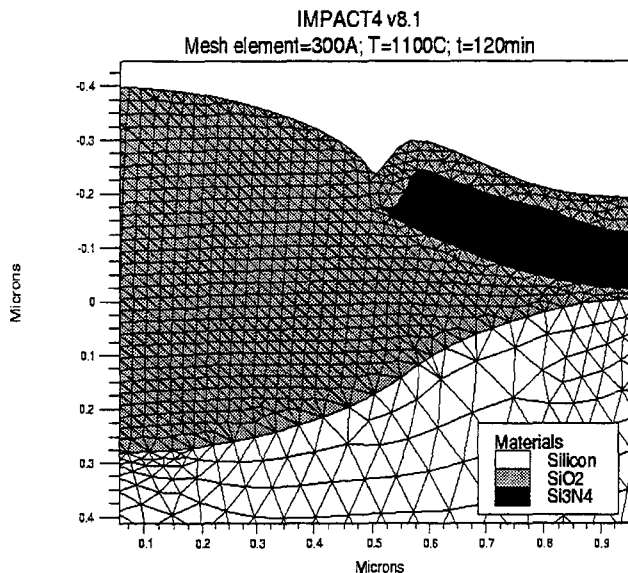


Figure III.14 – Exemple où on a atteint les limites de validité du test. L'épaisseur d'oxyde sur le nitrure est sur-estimée à l'endroit où la discrétisation spatiale de la couche d'oxyde est plus dense. Cas d'un LOCOS oxydé à 1100°C , pendant 120min, dimension d'un élément= $0.030\ \mu\text{m}$.

La validité du test décrit ci-dessus a cependant une limite. En effet, lorsque la discrétisation spatiale de la couche d'oxyde de nitrure est plus dense que deux couches d'éléments, alors le test n'est plus valable: le simulateur attribue aux éléments d'oxyde de nitrure la constante de réaction et le coefficient de diffusion de l'oxyde issu de l'oxydation du silicium: $D_o^{(si)}$ (Figure III.14).

Mais, si la division standard du maillage est utilisée, ce cas ne se présente jamais. La division standard correspond à des éléments de dimensions $0.040 \mu m - 0.050 \mu m$. Le test est donc efficace pour des épaisseurs d'oxyde de nitrure inférieures à $0.080 \mu m - 0.100 \mu m$. La Figure III.15 représente le temps maximal d'oxydation que l'on peut avoir, pour éviter d'atteindre les limites du test (c'est à dire pour une épaisseur maximale d'oxyde de $0.080 \mu m$). La courbe en pointillés représente le temps habituellement utilisé dans les procédés pour l'oxydation thermique.

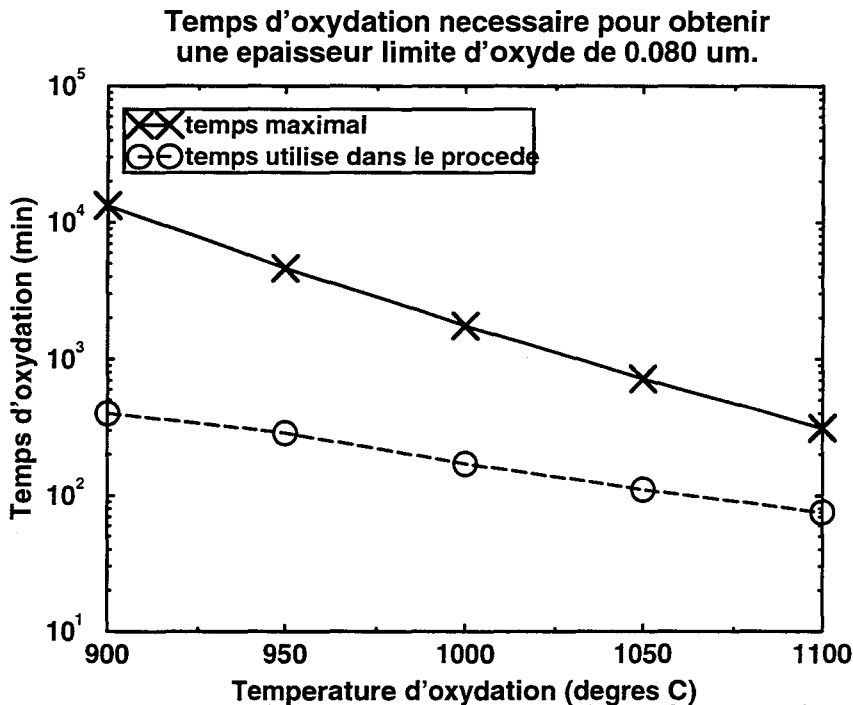


Figure III.15 - La courbe en trait continu représente le temps d'oxydation au bout duquel $0.080 \mu m$ d'oxyde a crû sur le nitrure, pour différentes températures. Ce temps est le temps maximal d'oxydation, que l'on peut appliquer, avant d'atteindre la limite de validité du test, lorsque les dimensions des éléments du maillage ne sont pas inférieures à $0.040 \mu m$. Pour comparaison, la courbe en traits discontinus correspond au temps moyen habituellement utilisé au cours des procédés de fabrication pour l'oxydation des structures d'isolement.

III.4 Application aux structures NCLAD

Il a été expliqué, au début de ce chapitre, que l'intérêt des NCLAD réside dans les "bouchons" ajoutés aux bords inférieurs des masques de nitrure. En effet, ceux-ci, modifient la forme du bec d'oiseau qui devient plus court puisque la diffusion d'oxydants sous les bords du masque est réduite. En conséquence, le perçage du piédestal d'oxyde est retardé. La section III.4.1 illustre dans le cas de structures enterrées et non enterrées de largeur $1.45 \mu m$, l'influence du "bouchon" sur le bec d'oiseau, et montre la nécessité de tenir compte de l'oxydation du nitrure pour simuler de manière prédictive ces structures.

La section III.4.2 présente les résultats de l'optimisation de la largeur du "bouchon" pour des structures NCLAD enterrées ou non oxydées à $1050^\circ C$.

Cependant, pour la génération CMOS $0.35 \mu m$ ce sont des structures de largeur $1.20 \mu m$, ayant un zone active de largeur $0.35-0.40 \mu m$ qui sont utilisées et qui doivent être optimisées. Il faut donc déterminer si les "bouchons" sont encore efficaces pour de telles caractéristiques géométriques. Dans la section III.4.3, on examine l'influence de la largeur du "bouchon" pour des structures ayant différents pitches et pour chaque pitch, différentes largeurs de nitrure. Puis, on analyse leur efficacité pour des structures ayant des dimensions proches de celles qui seront utilisées pour les CMOS $0.35 \mu m$.

Nous précisons que toutes les simulations, qui sont présentées dans cette section ont été réalisées en utilisant les valeurs des paramètres qui ont été calibrés dans le chapitre II.

III.4.1 Structures LOCOS (NCLAD) et LOCOS (NCLAD) enterré de pitch $1.45 \mu m$

Quatre structures de pitch $1.45 \mu m$ ont été oxydées à $1050^\circ C$, pendant 105 min: i) LOCOS, ii) LOCOS NCLAD, iii) LOCOS enterré, iv) LOCOS NCLAD enterré. Leurs caractéristiques technologiques sont résumées dans le tableau III.3.

Les Figures III.16 a-d) confrontent les photos SEM de ces structures avec les simulations leur correspondant. On observe un bon accord topologique entre le calcul et l'expérience. Sur les résultats de la simulation, il a été superposé la topologie avec (trait continu) et sans (traits discontinus) oxydation du nitrure.

id.	Pitch (μm)	Largeur du bouchon (μm)	Epaisseur du nitrure (μm)	Epaisseur du piédestal (μm)	Gravure du silicium (μm)	Largeur du nitrure (μm)
a)	1.45	0	0.1600	0.0150	0	0.6750
b)		0.0300				
c)	1.45	0	0.1600	0.0150	0.0500	0.6750
d)		0.0300				

Tableau III.3 – *Caractéristiques technologiques de structures a) LOCOS, b) LOCOS NCLAD, c) LOCOS enterré, d) LOCOS NCLAD enterré, permettant de mettre en exergue l'effet des "bouchons" sur le bec d'oiseau et le piédestal d'oxyde.*

Nous pouvons noter plusieurs effets, d'une part à propos de l'influence de la géométrie de la structure d'isolement (enterrée ou non, NCLAD ou non) sur la topologie finale, d'autre part à propos de la prise en compte ou non de l'oxydation du nitrure dans la simulation:

- Les LOCOS enterrés présentent l'avantage d'avoir un oxyde de champ plus enterré que celui des LOCOS, grâce à la gravure du silicium effectuée avant oxydation. Cependant, cette gravure, tout en permettant d'obtenir des structures oxydées plus planes, favorise l'oxydation latérale du silicium, sous le masque de nitrure, ce qui provoque une augmentation de l'épaisseur du bec d'oiseau, aidant au soulèvement du nitrure et au perçage du piédestal. Sur les photos III.16 a),b) et c),d), ces phénomènes sont nettement visibles.
- Les Figures III.16 b) et d) sont les "versions NCLAD" des structures des Figures III.16 a) et c), avec un "bouchon" de largeur $0.030 \mu m$. Nous observons que la présence de ces "bouchons" aide effectivement à la réduction du bec d'oiseau et donc du perçage. Cet effet est plus marqué sur la structure enterrée que sur le LOCOS simple, puisque le perçage est plus important pour la première que pour la dernière.
- L'ensemble de ces phénomènes est bien reproduit par simulation: enterrément du champ d'oxyde et perçage du piédestal plus marqués pour les LOCOS enterrés que pour les LOCOS; bec d'oiseau et perçage plus faibles pour les structures NCLAD que pour celles qui ne le sont pas. Nous pouvons aussi remarquer la bonne reproduction de l'épaisseur d'oxyde qui croît sur le nitrure.

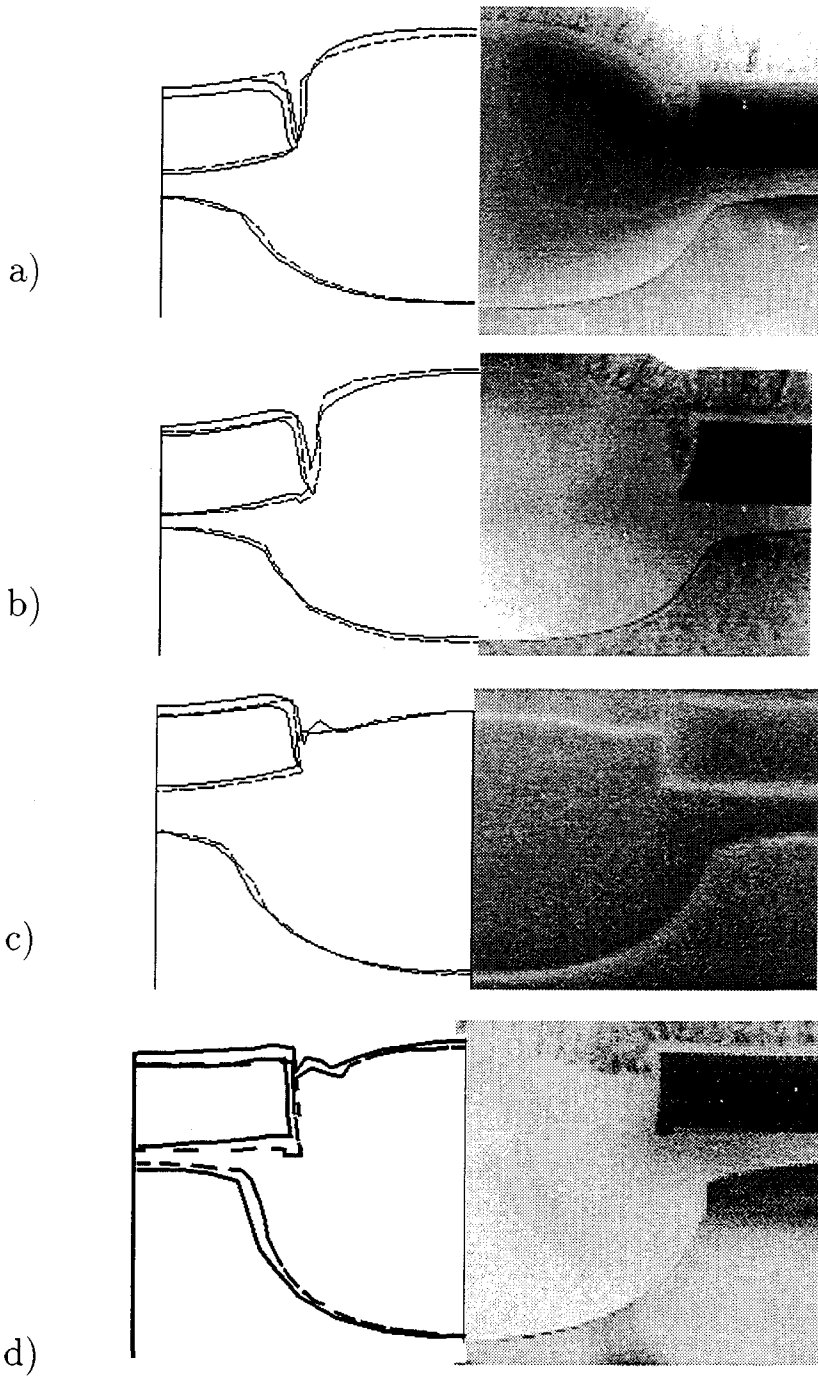


Figure III.16 – Structures: a) LOCOS; b) LOCOS NCLAD; c) LOCOS enterré; d) LOCOS NCLAD enterré, oxydées à 1050° C, pendant 105min. Elles sont décrites dans le tableau III.3. Trait continu: simulation avec oxydation du nitrure. Traits discontinus: simulation sans oxydation du nitrure.

- Enfin, nous observons que tenir compte de l'oxydation du nitrure est nécessaire pour bien reproduire la topologie des structures NCLAD. Ceci est surtout visible sur la Figure III.16 d) où l'on voit que si l'on ne tient pas compte de l'oxydation du nitrure dans la simulation, le nitrure ne se soulève pas suffisamment, par rapport au résultat expérimental. Le perçage du piédestal est alors sous-estimé. En effet, sans oxydation du nitrure, la barrière que constitue le "bouchon" de nitrure n'est pas consommée au cours du temps et reste intacte, réduisant autant la diffusion des oxydants au début et à la fin de l'oxydation thermique. Dans la réalité, cette barrière disparaît au cours du temps, favorisant peu à peu l'oxydation sous le nitrure.

Nous avons aussi observé qu'à la fin de l'oxydation de champ, tout le "bouchon" n'était pas entièrement consommé. Ceci est surtout visible sur la Figure III.16 d). Cette partie non consommée, si elle est trop importante (cas d'un "bouchon" large), risque d'être difficilement attaquable, lorsque le nitrure sera gravé, dans les étapes successives du procédé. A l'inverse, plus le "bouchon" est large, plus il est efficace. Nous nous sommes alors intéressés à la détermination de la largeur optimale du "bouchon", pour laquelle il y aurait un compromis entre la largeur du "bouchon" restant après oxydation et l'épaisseur du bec d'oiseau.

III.4.2 Optimisation de la largeur du "bouchon"

Le "bouchon" de nitrure étant la caractéristique qui procure l'efficacité des structures NCLAD, et celui-ci étant consommé au cours de l'oxydation de champ, sa largeur est déterminante.

Sur la Figure III.17 sont représentées l'épaisseur du bec d'oiseau (courbe en trait continu), et la largeur du "bouchon" restant après oxydation (courbe en traits discontinus) en fonction de la largeur initiale du "bouchon". Les courbes reliant les crois correspondent aux simulations, tandis que les cercles sont les résultats expérimentaux de mesures effectuées sur photos SEM.

Si on veut que tout le "bouchon" soit consommé à la fin des 105 min d'oxydation à 1050°C, alors, il doit avoir une largeur initiale de 0.020 μm . Cependant, pour cette valeur, le bec d'oiseau est peu réduit, par rapport à une structure non NCLAD.

L'épaisseur de "bouchon" pour laquelle il y a un compromis entre l'épaisseur du bec d'oiseau et la largeur du "bouchon" après oxydation se situe à l'intersection des deux courbes tracées sur la Figure III.17, ce qui correspond à une valeur de la largeur du "bouchon" de 0.046 μm . A 1050°C, l'épaisseur

d'oxyde qui croît sur le nitrure pendant 105 min est de $0.025 \mu\text{m}$. Elle correspond à une épaisseur de nitrure consommé: $0.025/1.79=0.014\text{\AA}$. Cette valeur correspond environ au tiers de la largeur optimisée.

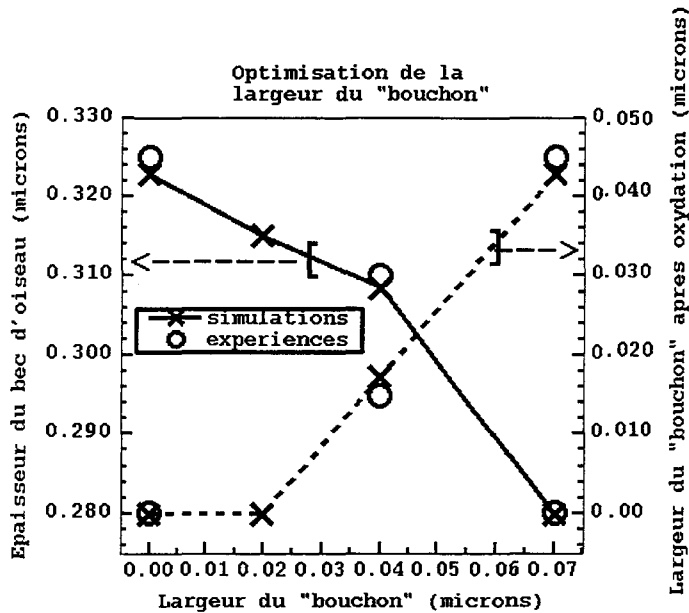


Figure III.17 – Epaisseur du bec d’oiseau et largeur du “bouchon” après oxydation en fonction de la largeur du “bouchon” initiale. L’intersection entre les deux courbes donne l’épaisseur optimale du “bouchon”.

Dans la section suivante, nous avons examiné l’influence de la largeur du “bouchon” sur les épaisseurs d’oxyde de champ et de piédestal d’oxyde, pour des structures LOCOS NCLAD de pitches plus étroit. Cette étude a été faite dans le but de déterminer si les “bouchons” sont encore efficaces pour des structures dont les caractéristiques géométriques sont proches de celles qui seront utilisées pour les CMOS $0.35 \mu\text{m}$.

III.4.3 Influence du “bouchon” sur des structures LOCOS NCLAD de pitches $1.70/1.45/1.20 \mu\text{m}$

La Figure III.18 représente d’une part les épaisseurs du champ d’oxyde (“fox”) en fonction de l’espacement entre les nitrures (graphes a), c) et e)) et d’autre part celles du piédestal en fonction de la largeur du nitrure (graphes b), d) et f)), pour des structures NCLAD, ayant des largeurs de “bouchon” de $0 \mu\text{m}$, de $0.040 \mu\text{m}$ ou de $0.070 \mu\text{m}$, oxydées à 1050°C , en milieu humide. Trois pitches sont étudiés: $1.70 \mu\text{m}$, $1.45 \mu\text{m}$ et $1.20 \mu\text{m}$. Les résultats expérimentaux, obtenus par mesure des épaisseurs sur les photos SEM, sont représentés avec leurs barres d’erreurs par des croix.

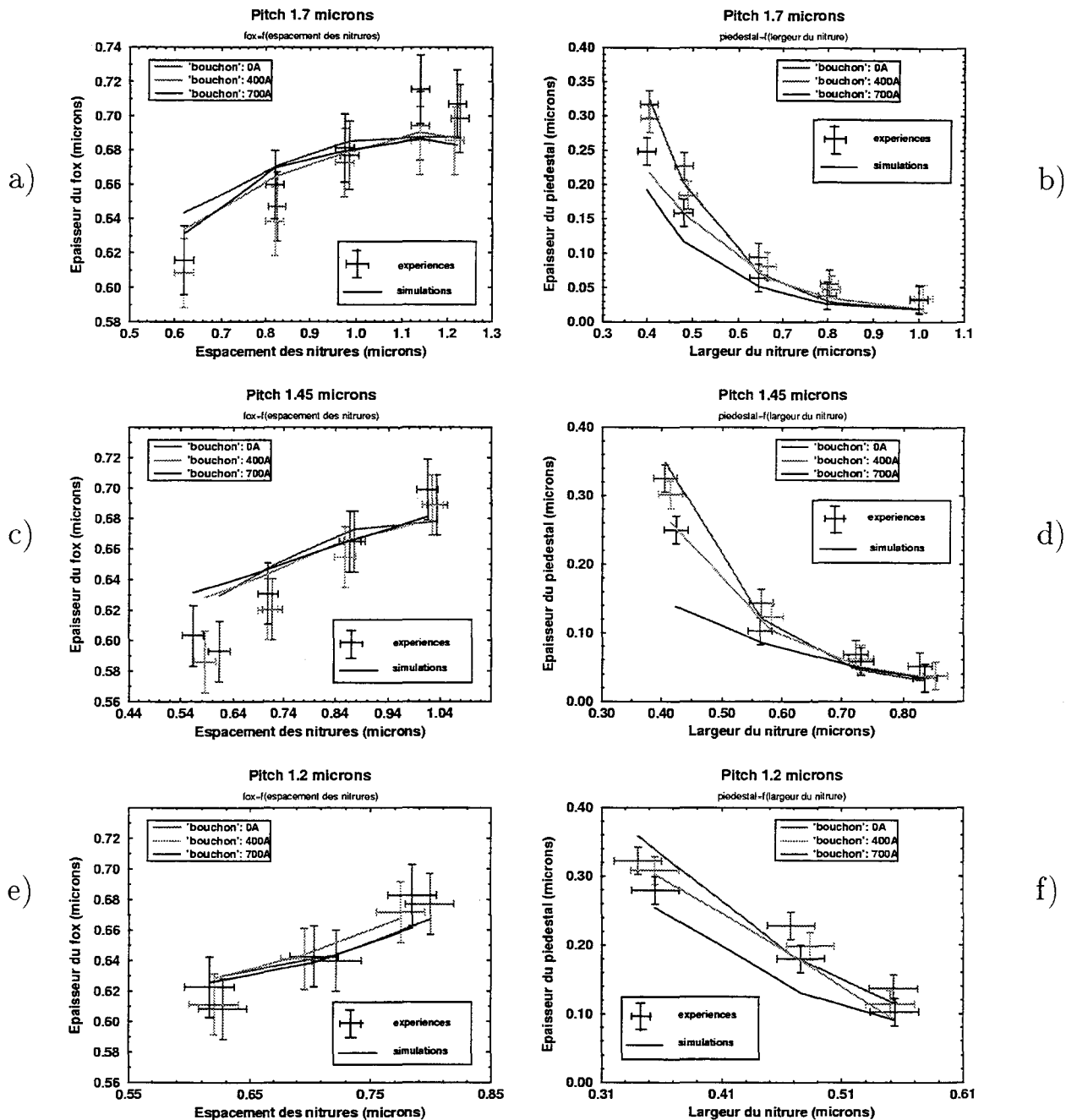


Figure III.18 – Courbes décrivant l'épaisseur de l'oxyde de champ (ou "fox") en fonction de l'espacement entre les nitrures (a), c), e)), et l'épaisseur du piédestal d'oxyde en fonction de la largeur du nitrure (b), d), f)), pour différentes structures de type NCLAD-LOCOS: a), b) pitch=1.70 μm ; c), d) 1.45 μm ; e), f) 1.20 μm ; largeur de "bouchon"=0 μm , 0.040 μm , 0.070 μm . On observe sur les graphes la diminution de l'épaisseur du piédestal, lorsque la largeur du "bouchon" croît, tandis que pour les graphes a), c) et e) l'épaisseur de l'oxyde de champ n'est pas affectée.

On observe un très bon accord entre les résultats simulés et les expériences.

On constate que l'épaisseur de l'oxyde de champ n'est que peu influencée par la largeur du "bouchon" de nitrure (graphes a), c) et e)). C'est le bec d'oiseau et le piédestal qui sont le plus modifiés (graphes b), d) et f)).

Si on compare pour chaque graphe b), d) et f) les courbes correspondant aux trois largeurs de bouchons différentes, on observe que plus celui-ci est large, plus l'épaisseur d'oxyde due au perçage est faible. Ceci signifie que plus la barrière est grande, plus la diffusion des oxydants est réduite sous le masque, et moins le perçage s'effectue avec facilité. Ceci est d'autant plus visible pour les larges pitches (graphe b)) et pour des nitrures étroits, car le perçage est d'autant plus favorisé par ces conditions géométriques.

On observe sur les graphes b), d) et f) que lorsque la largeur du nitrure est supérieure à une certaine valeur, la présence du "bouchon" n'a plus que peu d'effet sur l'épaisseur du piédestal d'oxyde. Cette valeur limite de la largeur du nitrure a été calculée comme étant le tiers de celle du pitch. Ainsi, si la largeur du nitrure est supérieure au tiers du pitch, le "bouchon" n'a que peu d'influence sur le piédestal. En revanche, si la largeur du nitrure est inférieure à cette valeur, le "bouchon" a une influence sur le piédestal.

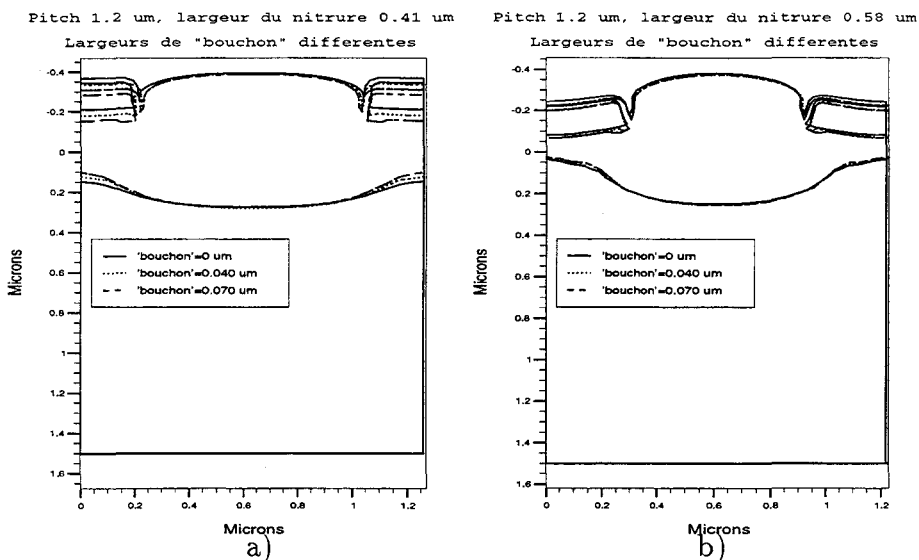


Figure III.19 - Confrontation de structures LOCOS NCLAD simulées, de pitch $1.20 \mu\text{m}$, ayant des largeurs de "bouchon" de $0 \mu\text{m}$, $0.040 \mu\text{m}$, $0.070 \mu\text{m}$. a) le nitrure a une largeur de $0.41 \mu\text{m}$; b) le nitrure a une largeur de $0.58 \mu\text{m}$.

A partir de ces résultats, nous avons analysé les structures dont le pitch est semblable à celui de la structure qui sera utilisée pour la génération CMOS 0.35 μm ; c'est à dire un pitch de 1.20 μm . Sur la Figure III.19 sont présentées les simulations de deux structures NCLAD ayant des nitrures de largeur: a) 0.41 μm ; b) 0.58 μm . Les trois structures superposées sur chaque schéma a) et b) ont des largeurs de "bouchon" de 0 μm , 0.040 μm et 0.070 μm .

Nous retrouvons bien ce qui a été dit précédemment: un nitrure large efface l'influence du "bouchon" sur l'épaisseur du bec d'oiseau et du piédestal.

Nous pouvons donc conclure en disant que les structures NCLAD sont intéressantes pour la réduction du bec d'oiseau, lorsque le nitrure est étroit par rapport au pitch (lorsque la largeur du nitrure est inférieure au tiers de celle pitch). Or les dimensions des structures d'isolement pour les CMOS 0.35 μm sont plus proches de la structure b) que de a): la largeur du nitrure est supérieure au tiers de celle du pitch. Et pour celle-ci, le "bouchon", quelque soit sa largeur n'a que peu d'effet. Des résultats semblables ont été obtenus avec des structures LOCOS NCLAD enterrées.

Il faut aussi ajouter que la fabrication des structures NCLAD réclame un plus grand nombre d'étapes de fabrication que celles nécessaires pour réaliser des LOCOS et des LOCOS enterrés. Donc, parce que l'amélioration apportée au bec d'oiseau n'est pas suffisamment marqué, et parce que la fabrication des structures NCLAD demande un plus grand nombre d'étapes, nous concluons que les structures NCLAD ne conviennent pas pour l'utilisation que l'on veut en faire: remplacer les structures actuelles d'isolement par des structures plus performantes.

III.5 Conclusions

Parmi les structures d'isolement en compétition pour les nouvelles génération de composants, on trouve la structure NCLAD (Nitrure clad, en anglais, ou habit de nitrure), de type LOCOS ou LOCOS enterré. Le masque d'oxydation de cette structure comporte des "bouchons" de nitrure sous ses bords, qui encapsulent la structure et réduisent la diffusion des oxydants sous le nitrure. Cette structure permet de limiter le perçage du piédestal d'oxyde, problème largement rencontré lorsque l'on passe à des structures très étroites.

La modélisation de l'oxydation du nitrure de silicium, ne peut pas être ignorée lors de l'étude de ces structures. En effet, toute leur efficacité réside dans le pouvoir de résistance des bouchons de nitrure à l'oxydation thermique. Après avoir étudié différents modèles d'oxydation, nous avons choisi

une version modifiée du modèle de Deal et Grove initialement utilisé pour l'oxydation du silicium.

Dans une seconde étape, nous avons implanté le modèle dans le programme de simulation IMPACT-4. La difficulté a été de trouver un moyen pour attribuer correctement les coefficients de diffusion, suivant la nature de la réaction (i.e: oxydation du silicium ou du nitrure). Un premier test reconnaît le matériau qui est oxydé et affecte ainsi la constante de réaction ad-hoc. Un second test permet de déterminer si l'élément d'oxyde considéré provient de l'oxydation du nitrure ou de celle du silicium et de lui affecter le bon coefficient de diffusion. Ce dernier test a une certaine limite lorsque le maillage est très dense.

Le simulateur enrichi de ce nouveau modèle reproduit de façon prédictive l'oxydation du nitrure se produisant au cours de la fabrication des structures NCLAD, dans des cas: i) mono-dimensionnel, ii) bi-dimensionnel. La nécessité de tenir compte de l'oxydation du nitrure et surtout de celle du "bouchon" a été mise en évidence pour des structures de pitch $1.45 \mu m$, de type (NCLAD)LOCOS et (NCLAD)LOCOS enterré.

L'efficacité des structures NCLAD est directement liée à la largeur du "bouchon". Grâce au modèle d'oxydation du nitrure nous avons pu optimiser cette largeur, pour une oxydation à $1050^{\circ}C$, pendant 105 min, ce qui nous a donné une valeur de $0.046 \mu m$. Elle correspond à un compromis pour lequel le bec d'oiseau et la largeur du "bouchon" après oxydation sont minimisés. La barrière de diffusion reste active le plus longtemps possible et à contrario, il ne reste que peu de "bouchon" non oxydé en fin de cinétique.

De manière générale, nous avons observé que le "bouchon" a une influence sur l'épaisseur du bec d'oiseau que lorsque la largeur du nitrure était inférieure au tiers de celle du pitch. Or, pour la génération CMOS $0.35 \mu m$, les structures d'isolement ont un pitch de $1.20 \mu m$ et une largeur de nitrure d'au moins $0.60 \mu m$, pour obtenir une zone active de largeur $0.35-0.40 \mu m$. Pour de telles dimensions, le "bouchon" n'a donc que peu d'influence sur l'épaisseur du bec d'oiseau. Ceci signifie qu'il existe peu de différences morphologiques entre des structures LOCOS et LOCOS NCLAD, ayant les dimensions utilisées pour la génération CMOS $0.35 \mu m$. Des résultats semblables ont été obtenus pour des structures enterrées. A ceci, il faut ajouter le fait qu'un grand nombre d'étapes sont nécessaires à la fabrication des NCLAD. Un plus grand nombre d'étapes, ainsi qu'une amélioration peu marquée pour les dimensions utilisées nous amène à la conclusion que les NCLAD ne peuvent être choisies comme structures de remplacement, pour l'utilisation que l'on

veut en faire.

Il est connu que la réduction des dimensions des structures d'isolement augmente le niveau de contraintes dans les matériaux. De même lorsque la géométrie d'une structure est modifiée, les niveaux de contraintes observés dans le substrat changent. Ces contraintes sont générées au cours des différentes étapes de la fabrication (dépôt de matériaux, gravure, oxydations thermiques...). Celles-ci comportent des montées et descentes en température, et des croissances de matériaux qui provoquent des déformations et donc la génération de contraintes.

De trop hauts niveaux peuvent cintrer la plaque de silicium, rompre les films déposés, et créer des défauts cristallins dans le substrat. Les dislocations qui en résultent correspondent à des déformations plastiques autour desquelles des phénomènes de ségrégation/précipitation se produisent entraînant localement une modification des propriétés électriques du silicium, souvent défavorables au bon fonctionnement des dispositifs.

Il est donc très important de pouvoir évaluer les niveaux de contraintes générées aux différentes étapes. Le programme de simulations IMPACT-4 permet de les calculer. Mais, pour vérifier l'exactitude de ces valeurs, il faut les confronter avec des résultats expérimentaux. Plusieurs techniques de mesure sont accessibles. Nous en avons utilisé une en particulier: le CBED (Diffraction Electronique par Faisceau d'Electrons Convergent), grâce au laboratoire LAMEL du CNR (Centre National de la Recherche) de Bologne, Italie.

L'étude des contraintes mesurées et simulées pour différentes structures d'isolement sont décrites dans le Chapitre IV.

Bibliographie

- [1] J.A. Appels, E. Kooi, M.M. Paffen, J.J.H. Schatorje, W.H.C.G. Verkuylen, *Philips Res. Repts*, **25**, (1970) p. 118-132.
- [2] J.R. Pfiester, P.U. Kenkare, R. Subrahmanyam, J.H. Lin, P. Crabtree, *Digest of VLSI, Tech. Symposium*, (1993), p. 139.
- [3] B. Baccus, D. Collard, P. Ferreira, V. Senez, E. Vandenbossche, "IMPACT-4: Isen Modeling Package For Integrated Circuit Technology, Version 4.8.1", (11/1996).
- [4] S.M. Sze, *VLSI Technology, second edition*, McGraw-Hill International Editions, (1988), p. 260-261.
- [5] A.E.T. Kuiper, M.F.C. Willemsen, J.M.L. Mulder, J.B. Oude Elferink, F.H.P.M. Habraken and W.F. van der Weg *J. Vac. Sci. Technol.*, **B7** (3), (Jun. 1989), p. 455-465.
- [6] T.L. Chu, C.H. Lee, G.A. Gruber, *J. Electrochem. Soc.*, **114**, (1967), p. 717-722.
- [7] A.E.T. Kuiper, M.F.C. Willemsen, J.M.G. Bax, F.H.P.M. Habraken, *Appl. Surf. Sci.*, **33/34**, (1988), p. 757.
- [8] T. Enomoto, R. Ando, H. Morita and H. Nakayama, *Jap. J. Appl. Phys.*, **17**, 6, (June 1978), p. 1049.
- [9] J.W. Fergus, W.L. Worrell, *J. Electrochem. Soc.*, **142**, 1, (Jan 1995), p. 183.
- [10] S.I. Raider, R. Flitsch, J.A. Aboaf, and W.A. Pliskin, *J. Electrochem. Soc.*, **123**, 4, (April 1976), p. 560-565.
- [11] F.H.P.M. Habraken, A.E.T. Kuiper, *Mat. Sci. and Eng.*, **R12**, (1994), p. 123-175.
- [12] Kainaskii, E.V. Degtyareva, V.A. Kuhtenko *Ogneupory*, **25**, (1960), p. 175.

- [13] E. Kooi, J.G. van Lierop. J.A. Appels, *J. Electrochem. Soc.*, **123**, 7, (1976), p. 1117-1120.
- [14] P.J. Jorgensen, *J. Chem. Phys.*, **37**, (1962), p. 874.
- [15] C.J. Han, C.R. Helms, *J. Electrochem. Soc.*, **134**, 2, (Feb. 1987), p. 504.
- [16] A. Reborá, *STMicronics internal publication*, unpublished, (1994).
- [17] T.I. Kamins, *Oxidation of Silicon Nitride*, unpublished, (July 1981).
- [18] C.J. Dell'Oca, *J. Electrochem. Soc.*, **120**, (1973), p. 1225-1230.
- [19] S.M. Sze, *VLSI Technology, second edition*, **McGraw-Hill International Editions**, (1988), p. 99.
- [20] D.R. Craven, J.B. Stimmell, *Semicond. Int.*, **59**, (Jun. 1981).
- [21] H. Miyoshi, N. Tsubouchi, A. Nishimoto, *J. Electrochem. Soc.*, **125**, (1978), p. 1824-1829.
- [22] Silvaco, SSUPREM III User's Manual, Version 5.5.3, (1994).
- [23] B.E. Deals and S.S. Grove, *J. Appl. Phys.*, **36**, (1965), p. 3770-3778.
- [24] R.J. Archer, *J. Opt. Soc. Am.*, **52**, (1962), p. 962.
- [25] A.S. Grove, *Physics and Technology of Semiconductor Devices*, **Wiley, New York**, (1982) chap. 9.
- [26] E.A. Taft, *J. Electrochem. Soc.*, **118**, 8, (Aug. 1971), p. 1341-1346.
- [27] V. Senez, "Modélisation bidimensionnelle de l'oxydation du silicium: analyse viscoélastique de la relaxation des contraintes", *Thèse présentée à l'Université des Sciences et Technologies de Lille*, N° d'ordre: **1449**, (Jan 1995).
- [28] F. Hecht, A. Marocco, *Internal Report on MSHPTS*, **INRIA, Rocquencourt, France**, (Feb. 1986).
- [29] D. Collard, B. Baccus, V. Senez, "Pseudo-analytical Modelling of Stress Dependant Silicon Oxidation", *NUPAD'92*, (1992), p. 491.
- [30] S.W. Sloan, "A Fortran Program for Profile and Wavefront Reduction", *Int. J. for Num. Meth. in Eng.*, **28**, (1989), p. 2651.

Chapitre IV

Mesure des Contraintes du Substrat de Si par CBED

L'évolution des circuits intégrés vers une capacité de traitement de l'information plus grande et plus rapide entraîne une miniaturisation gigantesque des structures de base (tableau IV.1).

	1989	1991	1994	1997	2000
Dimensions minimales d'un motif (μm)	0.8	0.6	0.35	0.25	0.15
Nombre de transistors	4M	16M	64M	256M	1024M
Taille de la puce (cm^2)	0.9	1.4	2.1	4	7.5
Niveaux de masques	18	20	25	28	32
Niveaux de métal	2	3	4	5	6
Défauts tolérables par niveau de masque (cm^{-2})	0.028	0.02	0.012	0.0029	0.0015

Tableau IV.1 – *Evolution constatée et prévisible de la technologie durant la décennie en cours [1].*

Cette réduction des dimensions entraîne une augmentation des risques de défaillance. Or une des raisons à ces problèmes est l'augmentation du niveau moyen des contraintes mécaniques. Il faut donc, à chaque étape du procédé, veiller à minimiser les risques de dysfonctionnement du composant final. Par exemple, dans le cas de l'étape d'isolement, c'est au niveau du "bec d'oiseau" que se situe le point le plus critique. En effet, c'est à cet endroit que sont localisées les plus fortes contraintes mécaniques [2]. Ce niveau important des contraintes peut entraîner des dommages irréparables comme par exemple la rupture du piédestal d'oxyde [3].

Pour optimiser les dispositifs par rapport au critère "contrainte", il faut

dans un premier temps disposer d'un simulateur qui calcule l'évolution des contraintes mécaniques à chaque étape du procédé. C'est le cas du simulateur IMPACT-4 [3]. Ensuite, il faut pouvoir mesurer les contraintes pour valider les simulations et surtout vérifier les résultats de l'optimisation. Ici, deux méthodes que l'on qualifiera d'indirecte ou de directe, peuvent être employées. Dans le premier cas, on utilise des mesures de profils de dopage ou de courant de fuite pour analyser les influences des contraintes sur eux [5, 6]. Dans le second cas, on procède à la mesure directe des déformations de la maille élémentaire du substrat de silicium [7, 8, 9].

Dans ce chapitre, nous rappèlerons d'abord les origines des contraintes générées au cours des étapes de fabrication des structures d'isolement ainsi que la manière dont elles sont calculées dans IMPACT-4. Puis, nous décrirons comment des travaux comme ceux de Osada [5] et Smeys [6] permettent de mettre en évidence l'influence des contraintes sur les caractéristiques physiques des dispositifs. Ensuite, nous détaillerons quelques techniques de mesure des contraintes, dont les résultats ont été confrontés aux simulations. Parmi ces techniques, on trouve le CBED (Diffraction Electronique de Faisceau Convergent). Nous l'avons appliquée à une structure de type LOCOS, non oxydée, et à une structure de type LOCOS enterré oxydée. Les résultats ont été confrontés avec succès aux simulations faites avec IMPACT-4.

IV.1 Origines des contraintes mécaniques

La fabrication des structures d'isolement consiste en une succession d'étapes de dépôt et d'oxydation. Chacune de ces opérations génère des contraintes dans le substrat, qui peuvent être répertoriées en quatre catégories.

IV.1.1 Les contraintes d'origine thermique

La fabrication d'une structure d'isolement de type LOCOS se traduit par l'assemblage de deux, voire trois matériaux ayant des coefficients de dilatation thermique différents [10, 11]. Les valeurs reportées dans IMPACT-4 sont les suivantes:

$$\alpha_{Si} = 4.5 \cdot 10^{-6} / ^\circ C \quad (\text{IV.1})$$

$$\alpha_{SiO_2} = 0.5 \cdot 10^{-6} / ^\circ C \quad (\text{IV.2})$$

$$\alpha_{Si_3N_4} = 0.5 \cdot 10^{-6} / ^\circ C \quad (\text{IV.3})$$

où α_{Si} , α_{SiO_2} , $\alpha_{Si_3N_4}$ sont respectivement les coefficients de dilatation thermique du Si , SiO_2 , Si_3N_4 .

Ces différences sont à l'origine des déformations et des contraintes thermiques générées dans les films et le substrat. Sur la Figure IV.1, nous avons décrit schématiquement la manière dont elles se forment.

Nous avons considéré le système mono-dimensionnel constitué par un film et un substrat (Figure IV.1 a)). Le film a été déposé à une température T_0 et on analyse le retour à la température ambiante.

Considérons un état initial virtuel où le substrat et le film sont séparés l'un de l'autre, dans un état de contraintes nulles, à la température initiale $T = T_0$ (Figure IV.1 a)). Lors du retour à la température ambiante ($T < T_0$), le film et le substrat, virtuellement libres l'un de l'autre, se contractent de manière différente, due aux différences de coefficients d'expansion thermique. Supposons que le film se contracte plus que le substrat (Figure IV.1 b)). Pour qu'il garde les dimensions du substrat, il faut donc exercer une force en traction (Figure IV.1 c)). A partir de là, on peut le "re-coller" virtuellement au substrat, tout en maintenant cette force de traction (Figure IV.1 d)). Si la force de traction est supprimée (ce qui correspond à la réalité), le film cherche à se contracter mais il en est partiellement empêché par le substrat, dont il est solidaire. Le film reste alors dans un état de tension et entraîne en surface du substrat un état de compression (Figure IV.1 e)).

Sous certaines hypothèses, on peut modéliser la déformation dans le film, $\epsilon(T)$, due à la différence entre les coefficients d'expansion thermique de la manière suivante [12]:

$$\epsilon(T) = \int_{T_0}^T [\alpha_s(T) - \alpha_f(T)] dT \quad (\text{IV.4})$$

où $\alpha_f(T)$ et $\alpha_s(T)$ sont les coefficients d'expansion thermique du film et du substrat, T est la température ambiante, et T_0 est la température initiale où le substrat et le film se trouvent dans un état libre de contraintes.

En faisant les hypothèses que: i) les coefficients d'expansion thermique sont indépendants de la température, ii) il n'existe pas de gradient de température dans les matériaux, iii) l'épaisseur du film est beaucoup plus petite que celle du substrat, iv) le système est en condition de contraintes planes, v) le film est homogène et a un comportement élastique isotrope, la relation (IV.4) devient:

$$\epsilon_{th}^f(T) = (\alpha_s - \alpha_f)(T - T_0) \quad (\text{IV.5})$$

La contrainte thermique dans le film peut alors être exprimée ainsi:

$$\sigma_{th}^f = [D_f](\alpha_s - \alpha_f)(T - T_0) \quad (IV.6)$$

où $[D_f]$ est la matrice de rigidité du film.

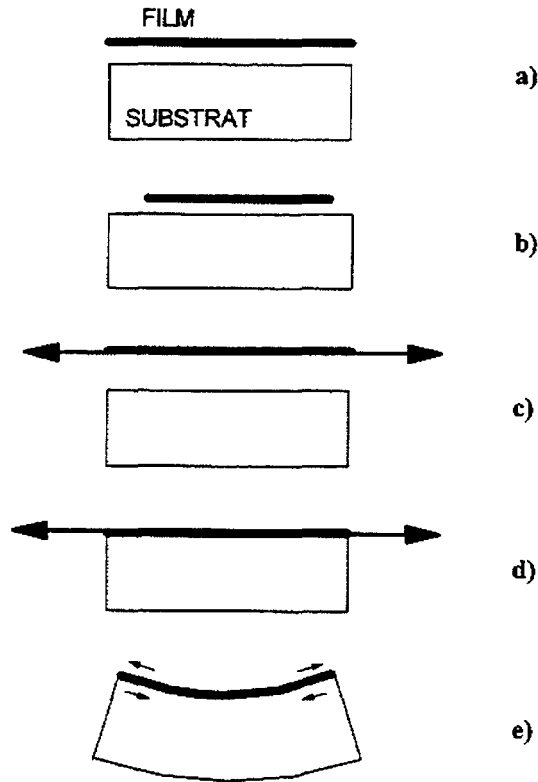


Figure IV.1 – Etablissement des contraintes d’origine thermique dans un film: [13] a) A $T = T_0$, le film est séparé du substrat: état de contraintes nulles; b) La température est modifiée ($T < T_0$): le film se contracte par rapport au substrat; c) Pour que le film retrouve les dimensions du substrat, une force de traction doit lui être appliquée; d) Le film peut alors être virtuellement “recolé” sur le substrat, la force de traction étant maintenue; e) La force de traction est supprimée: le film cherche à revenir aux dimensions de b). Mais, étant solidaire du substrat, il ne peut revenir complètement aux dimensions de b): une contrainte tensile subsiste dans le plan du film. Cependant sa contraction a entraîné une déformation du substrat qui se retrouve en compression.

IV.1.2 Les contraintes intrinsèques

Les contraintes intrinsèques, souvent appelées aussi contraintes de dépôt sont fondamentalement reliées au procédé de dépôt du film. Les paramètres

de croissance du film tels que sa nature, la température, la pression, la concentration des réactifs, l'incorporation d'impuretés ou de dopants, influencent de manière significative l'état de contraintes. Les contraintes intrinsèques sont le résultat d'un positionnement désordonné des atomes constitutifs du film. Les contraintes compressives (< 0) se développent lorsque les atomes sont plus proches les uns des autres qu'ils le seraient dans leur état d'équilibre. En revanche, pour les contraintes tensiles (> 0) c'est le contraire [14]. Il n'existe pas de modèle permettant de calculer ces contraintes, mais elles peuvent être déduites des contraintes résiduelles par la relation (IV.7). Les contraintes résiduelles sont les contraintes que l'on mesure, par exemple par la méthode de déflexion (décrite dans la section IV.2.2 a)).

$$\sigma_{intr}^{(f)} = \sigma_{rés}^{(f)} - \sigma_{th}^{(f)} \quad (IV.7)$$

où $\sigma_{intr}^{(f)}$, $\sigma_{rés}^{(f)}$, $\sigma_{th}^{(f)}$ sont respectivement les contraintes intrinsèques, résiduelles et thermiques présentes dans le film f.

Dans le tableau IV.2, nous avons répertorié quelques exemples de valeurs des contraintes résiduelles mesurées dans des films d'oxyde et de nitrure déposés selon différents procédés sur un substrat de silicium.

Film	Procédé	Température (°C)	$\sigma_{rés}^{(f)}$ (dynes/cm ²)
SiO ₂	CVD	450	+2 · 10 ⁹ à +5 · 10 ⁹ [15]
SiO ₂	thermique	900 à 1200	-2 · 10 ⁹ à -3 · 10 ⁹ [16]
Si ₃ N ₄	CVD	775	+10 · 10 ⁹ [17]
Si ₃ N ₄	sputtering		-1 · 10 ⁹ à -5 · 10 ⁹ [19]

Tableau IV.2 – Contraintes résiduelles ($\sigma_{rés}^{(f)}$) de films de Si₃N₄ et SiO₂ déposés selon différents procédés, sur un substrat de silicium.

Les films de nitrure déposés par CVD présentent une contrainte tensile intrinsèque très élevée. Ainsi, un film très épais de Si₃N₄ (plus de 0.300 μm) peut craquer par lui-même [17].

De très nombreux autres résultats peuvent être consultés dans l'article de Hu [18].

IV.1.3 Les contraintes issues de la croissance d'un matériau

Au cours d'un procédé de fabrication, les étapes d'oxydation et de siliciuration font croître un matériau sur le substrat de silicium.

Au cours de ces étapes, un volume de *Si* est converti en un autre matériau occupant un volume plus important. Cette augmentation de volume est à l'origine de la création de contraintes. Une incertitude existe cependant sur la manière dont se réalise cette augmentation de volume: soit isotropiquement [20, 21, 22], soit unidimensionnellement [23, 24]. Dans le premier cas, l'oxyde subit des contraintes tangentielles compressives, dans le second cas, ces dernières sont nulles, car l'augmentation de volume s'effectue dans la direction normale à l'interface.

Lors de l'oxydation d'une surface de silicium non plane, cas des structures d'isolement, l'oxyde ne croît plus simplement verticalement. Les déformations latérales de chaque élément de volume de l'oxyde ne restent pas longtemps constantes. Pour une surface concave, l'oxyde est sous compression, puisque les éléments de volume voisins croissent les uns dans les autres. Pour une surface convexe, l'oxyde est soumis à une tension tangentielle. Ces déformations génèrent de hauts niveaux de contraintes.

IV.1.4 Application à IMPACT-4

IMPACT-4 peut calculer les contraintes générées dans les matériaux au cours de l'oxydation de champ. Dans une version récente (Nov. 1996) [25], deux modèles, permettant de calculer les contraintes générées aux étapes de dépôt et de gravure ont été ajoutés. Ils ont été implantés par P. Ferreira au cours de son travail de thèse [26]. Les déformations créées au cours des étapes de dépôt, de gravure et d'oxydation sont calculées pour tous les matériaux, en appliquant la relation fondamentale de la dynamique, exprimée par les équations (IV.8) et (IV.9) à la structure étudiée:

$$F_x + \frac{\delta\sigma_{xx}}{\delta x} + \frac{\delta\sigma_{xy}}{\delta y} = 0 \quad (\text{IV.8})$$

$$F_y + \frac{\delta\sigma_{yy}}{\delta y} + \frac{\delta\sigma_{xy}}{\delta x} = 0 \quad (\text{IV.9})$$

où σ_{xx} , σ_{yy} et σ_{xy} sont respectivement les contraintes normales en x et y, et la contrainte de cisaillement en xy; $\vec{F}(F_x, F_y)$ est l'ensemble des forces appliquées à la structure.

Les évolutions topographiques de la structure et les phénomènes impliqués sont analysés au travers d'une discrétisation spatiale et temporelle. Au début de chaque pas de temps, l'état des contraintes est obtenu par superposition des contraintes thermiques, intrinsèques, de croissance d'un matériau (oxydation) et celles accumulées au cours des étapes précédentes.

Résoudre le système d'équations différentielles (IV.8) et (IV.9) consiste à exprimer les relations déformations-contraintes pour chaque matériau.

Le silicium est considéré comme un matériau élastique, et le système se résoud par la loi de Hooke:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \left(\chi \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + G \cdot \begin{bmatrix} 4/3 & -2/3 & 0 \\ -2/3 & 4/3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.10})$$

où χ et G sont les modules de compressibilité et de rigidité qui s'expriment par:

$$\chi = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (\text{IV.11})$$

L'oxyde et le nitrure sont considérés comme des matériaux adoptant un modèle viscoélastique; la résolution du système d'équilibre donne alors:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \left(\chi \cdot \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \frac{\eta^{(mat)}_{(T,\sigma)}}{\Delta t} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.12})$$

où $\eta^{(mat)}_{(T,\sigma)}$ est la viscosité du matériau, qui suit la loi non-linéaire de Eyring (equation II.13, Chapitre II); Δt est l'incrément de temps considéré par la simulation, pendant lequel la vitesse de déformation est prise constante.

Nous allons maintenant voir avec quelques exemples comment les contraintes peuvent modifier les caractéristiques physiques des dispositifs, et comment leurs modification permettent de les étudier de manière indirecte. Ensuite, nous décrirons quelques méthodes d'étude directe des contraintes.

IV.2 Etude indirecte/directe des contraintes

Les contraintes peuvent avoir une influence non seulement sur la cinétique de l'oxydation du silicium mais aussi sur d'autres phénomènes physiques. En mesurant ces effets, il est possible d'avoir une mesure "indirecte" du niveau de contraintes. Pour illustrer ces effets, nous allons décrire succinctement deux travaux, d'abord sur la diffusion du bore (travaux de Osada [5]), puis sur les courants de fuite au niveau de la jonction PN (travaux de Smeys [6]). Il existe également des techniques de mesures "directe" des contraintes. Par ordre

de complexité, on trouve la méthode de déflexion, la spectroscopie micro-Raman et la méthode CBED. La première a permis de mesurer les contraintes intrinsèques dans des films: i) de nitrure déposé par CVD et ii) d'oxyde de silicium thermique [27]. La seconde nous a donné des résultats expérimentaux que nous avons confrontés aux simulations faites avec IMPACT-4. La troisième (méthode CBED), utilisée pour mesurer les contraintes de plusieurs structures d'isolement, sera décrite en détail dans la section IV.3.

IV.2.1 Etude indirecte des contraintes

a) Effet des contraintes sur la diffusion de Bore

Il a été observé [28] [29], que la diffusion de dopants implantés dans le silicium et situés sous un film de nitrure de silicium était réduite par rapport au cas d'un substrat nu. Osada et al [5] ont étudié les effets des contraintes générées par un film de Si_3N_4 sur la diffusion de Bore implanté dans le silicium.

Des échantillons ont été préparés afin d'obtenir une structure comportant trois zones, comme sur la Figure IV.2: i) zone ON où le film de nitrure est déposé après oxydation thermique du substrat; ii) zone nue où le silicium est recouvert d'aucun film; iii) zone N où le nitrure est déposé directement sur le substrat. Différentes épaisseurs de nitrure ont été utilisées.

Le Bore est implanté à une dose de $7.5 \cdot 10^{13}/cm^2$, à 70keV. Après gravure, la diffusion est effectuée en ambiance azotée à des températures comprises entre 900°C et 1100°C de 60 à 600 minutes. Les profils de dopant sont mesurés par SIMS (Spectroscopie de Masse d'Ions Secondaires).

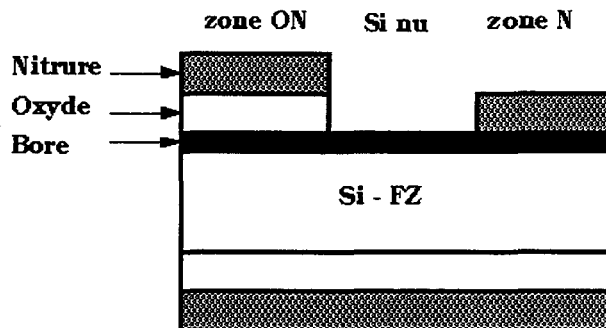


Figure IV.2 – Coupe de la structure utilisée par Osada pour étudier les effets des contraintes, engendrées par le nitrure dans le silicium, sur la diffusion de Bore implanté dans le substrat [5].

Ces profils montrent une réduction de la diffusion lorsque l'épaisseur du nitrure augmente (Figure IV.3). La présence de la couche de SiO_2 entre le

nitruire et le silicium engendre une diffusion plus importante du Bore par comparaison avec la zone N.

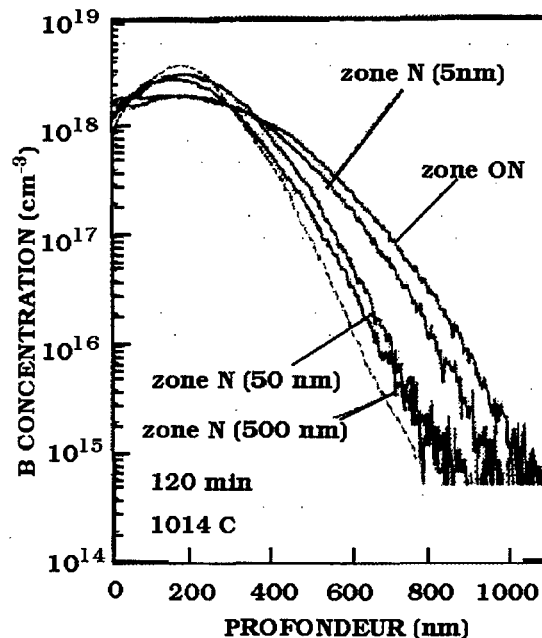


Figure IV.3 – Comparaison des profils de diffusion sous les domaines N et ON, obtenus expérimentalement à partir d'analyses SIMS. Le temps de recuit à 1014°C est 120 min. Les épaisseurs du nitruire du domaine N sont 0.005, 0.050 et 0.500 μm . La courbe en traits discontinus correspond au profil après implantation [5].

Les contraintes intrinsèques, de type tensiles, présentes dans le nitruire, ont été mesurées: elles sont de l'ordre de 10^{10} dynes/cm² [5]. Elles créent un état de contrainte compressif dans le substrat. L'insertion d'une couche d'oxyde thermique entre le nitruire et le silicium permet "d'absorber" les contraintes générées par le film de nitruire et donc réduit le niveau des contraintes compressives dans le substrat. Il est reconnu qu'un état de compression affecte la diffusion des dopants [30]. Dans le cas de la diffusion de Bore, on modélise cet effet par une réduction de la concentration à l'équilibre en lacunes et interstitiels ainsi que par une modification de l'énergie de liaison de la paire BI [31], fonction du niveau des contraintes.

b) Effet des contraintes sur le courant de fuite de la jonction PN

Les contraintes mécaniques générées au cours des différentes étapes du procédé de fabrication peuvent altérer les performances des dispositifs, même lorsqu'aucun défaut (dislocations...) n'est introduit. Smeys [6] s'est appliqué à montrer qu'il existait une corrélation directe entre le niveau des contraintes

résiduelles et les courants de fuite de la jonction N⁺P dans un dispositif de type diode.

Dans le but d'étudier les contraintes induites par l'oxydation, huit structures d'isolement de type LOCOS et LOCOS enterré, ayant des épaisseurs de nitrure et des profondeurs de gravure différentes, ont été fabriquées. Elles sont décrites dans le tableau IV.3. Leur pitch est de 14 μm , et elles ont été oxydées à 1000°C. Des diodes (dont le contact déborde sur la structure d'isolement) ont ensuite été réalisées avec ces structures.

	Non enterré	gravure: 0.10 μm	gravure: 0.15 μm
Si_3N_4 de 0.10 μm	X	X	X
Si_3N_4 de 0.15 μm		X	X
Si_3N_4 de 0.20 μm	X	X	X

Tableau IV.3 – Caractéristiques technologiques des structures LOCOS fabriquées [6].

Des simulations de ces structures obtenues avec SUPREM-IV [32] montrent un très bon accord entre les contraintes calculées et celles mesurées par des techniques de diffraction TEM [33]. D'après ces simulations, les contraintes compressives situées sous les bords du nitrure augmentent avec l'épaisseur du nitrure et la gravure du silicium. Sur la Figure IV.4 les contraintes compressives sont représentées en fonction de l'épaisseur du nitrure et de la gravure du silicium. Ceci a aussi été vérifié par des mesures réalisées par micro-Raman [6]. Enfin, des mesures ont été effectuées par rayons X, afin de mettre en évidence la présence de défauts étendus. Ceux-ci ne sont observés que pour des structures hautement contraintes (épaisseur de nitrure de 0.20 μm et gravure de 0.15 μm).

Le courant de fuite est mesuré, pour une tension constante de 5V, dans la zone périphérique. Sur la Figure IV.5 est représenté le courant de fuite périphérique en fonction de l'épaisseur du nitrure et de la profondeur de la gravure. En confrontant les Figures IV.4 et IV.5, il apparaît évident que les contraintes compressives et le courant de fuite évoluent de la même façon en fonction des mêmes paramètres. L'explication suivante peut être donnée: en présence de contraintes compressives, la largeur de la bande interdite est réduite, favorisant ainsi le passage du courant.

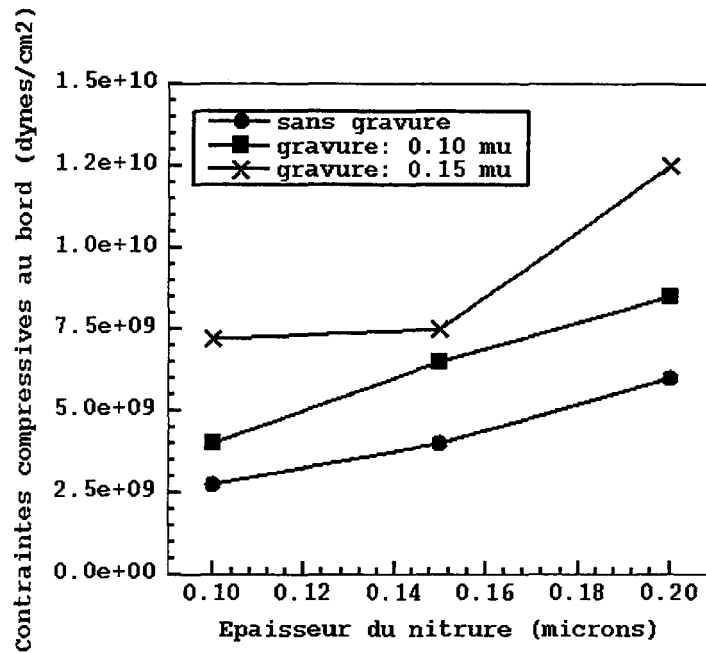


Figure IV.4 – Contraintes compressives moyennes, situées dans les régions sous les bords du nitrure, en fonction de l'épaisseur du nitrure et de la profondeur de la gravure dans le silicium [6].

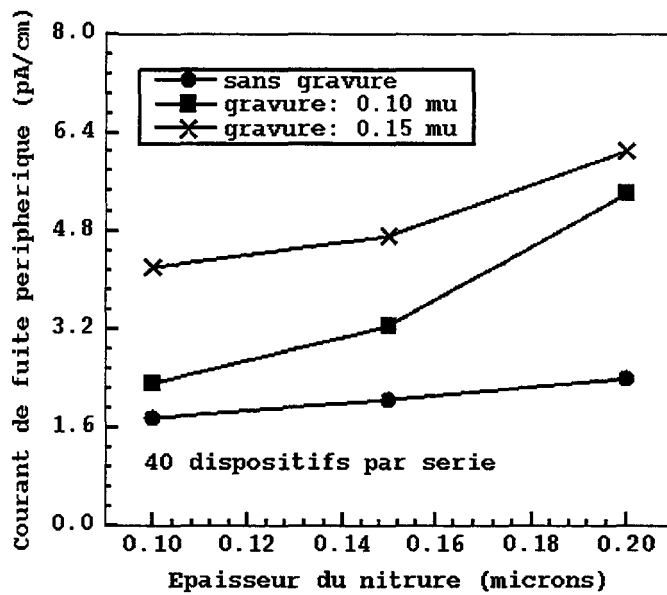


Figure IV.5 – Courant de fuite mesuré dans la zone périphérique (située sous les bords du nitrure) en fonction de l'épaisseur du nitrure et de la profondeur de la gravure dans le silicium [6].

Des résultats semblables ont été obtenus avec des structures d'isolement de type tranchée (ou BOX) en modifiant le pitch et la longueur de la zone active. La réduction du pitch et de la longueur de la zone active entraînent une augmentation du niveau des contraintes compressives provoquant une croissance du courant de fuite [6].

Les expériences réalisées par Smeys permettent donc de mettre en relief les effets des contraintes, générées par le procédé de fabrication, sur les caractéristiques électriques des dispositifs. Ainsi, les contraintes compressives peuvent être reliées directement au courant de fuite: elles peuvent donc être calculées indirectement à partir de ce courant.

Si on ajoute à ces deux exemples le phénomène d'oxydation du silicium, on s'aperçoit qu'il existe différentes possibilités de mesure du niveau des contraintes mécaniques dans un dispositif. En modélisant l'effet des contraintes sur ces phénomènes (diffusion, oxydation...), on peut, de manière indirecte, calibrer et prédire le niveau des contraintes. C'est cette méthode qui est utilisée depuis de nombreuses années [34]. Cependant, l'exactitude de cette calibration est limitée: i) par la précision des mesures de profils de diffusion, d'épaisseur d'oxyde, d'intensité des courants de fuite... et ii) par la modélisation physique de ces effets des contraintes qui reste macroscopique. De plus, par cette méthode, il est impossible d'accéder aux différentes composantes du tenseur des contraintes. C'est pourquoi ont été développées des méthodes de mesure "directe" des contraintes mécaniques que nous allons détailler dans les paragraphes suivants.

IV.2.2 Mesures directes des contraintes

a) Mesures par déflexion

Cette méthode permet de mesurer les contraintes intrinsèques à partir des contraintes résiduelles présentes dans les films de nitrure déposé par CVD et d'oxyde thermique, comme ceci a été réalisé par P. Colpani [27].

Lorsqu'un film est déposé sur une plaque de silicium, ses contraintes résiduelles (intrinsèques et thermiques) vont déformer le substrat [7].

La relation entre le rayon de courbure du substrat et la contrainte résiduelle présente dans le film a été établie par Stoney:

$$\sigma_{rés.}^{(f)} = \frac{R - R_0}{6RR_0} \frac{E_s h_s^2}{(1 - \nu_s) h_f} \quad (IV.13)$$

où $\sigma_{rés}^f$ est la contrainte résiduelle présente dans le film; h_f est l'épaisseur du film; w est la largeur de la plaque; R_0 et R sont les rayons de courbure de la plaque, respectivement avant et après la déposition du film, supposés très grand devant l'épaisseur $h_f + h_s$; E_s le module d'Young du substrat; ν_s le coefficient de Poisson du substrat; h_s est l'épaisseur du substrat.

Notons que la contrainte résiduelle dans le film ne dépend que des caractéristiques élastiques du substrat. La seule caractéristique du film prise en compte est l'épaisseur du film h_f . Par convention, lorsque le film est en tension, sa contrainte résiduelle est positive et R est compté positivement, et inversement lorsqu'il est en compression.

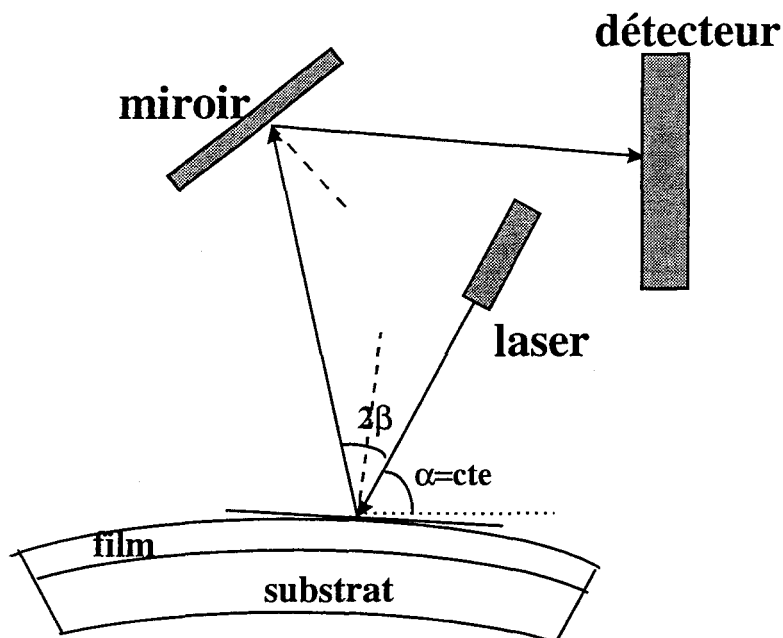


Figure IV.6 – Schéma de principe de la mesure de la courbure d'une plaque sous contraintes, par déflection. Le faisceau laser se déplaçant par balayage sur la surface est réfléchi par le film puis par le miroir avant d'être recueilli par le détecteur, sensible à la position du faisceau réfléchi.

La mesure du rayon de courbure se fait en utilisant la méthode de la flèche. C'est une méthode non destructive, rapide, valable aussi bien pour les matériaux amorphes que cristallins. Il faut cependant vérifier que:

- l'épaisseur et la rigidité du film sont négligeables par rapport à celles du substrat,
- le substrat de silicium a un comportement élastique,

- les contraintes sont planes et non discontinues dans le film.

La mesure du rayon de courbure utilise des dispositifs par contact direct d'un stylet sur la surface de l'échantillon [35], ou par faisceau laser. C'est ce dernier système qui est utilisé le plus couramment comme à STMicroelectronics.

Le principe, schématisé sur la Figure IV.6 est le suivant: un faisceau laser, ayant un angle constant α avec l'horizontale, parcourt pas à pas la surface courbée du bicouche film/substrat. Le faisceau est réfléchi par le film avec un angle 2β par rapport au faisceau incident. Il est à nouveau réfléchi par un miroir pour être dirigé vers un détecteur qui traduit la position à laquelle il arrive en une tension électrique. Un logiciel permet de relier la valeur de la tension à une valeur de courbure.

L'inconvénient de cette méthode est qu'elle ne donne qu'une valeur "moyenne" de la contrainte dans le film et qu'elle se limite à des dépôts pleine plaque destinés à caractériser des films. Or dans le cas de structures d'isolement, on souhaite dresser une cartographie bi-dimensionnelle des contraintes. Pour cela, la spectroscopie micro-Raman est plus adaptée.

b) Mesures par spectroscopie micro-Raman

La spectroscopie Raman est un moyen très efficace pour l'étude des propriétés vibratoires des cristaux [36]. A partir des années 1970, les chercheurs commencèrent à étudier les effets des déformations des constantes de maille sur les spectres micro-Raman du silicium. Ils démontrèrent la possibilité de détecter différentes formes de contraintes grâce à la spectroscopie Raman [36]. Depuis les années 1980, l'application de cette technique s'est répandue à des structures microscopiques [2, 8, 37, 38, 39, 40, 41].

Le principe de la mesure des contraintes par spectroscopie micro-Raman va maintenant être présentée. Elle va être suivie d'un exemple d'application sur une structure de type PBL non oxydée.

i) Principe de la spectroscopie micro-Raman: Le principe de la spectroscopie micro-Raman est de provoquer, par l'intermédiaire d'un faisceau laser incident, l'oscillation des noyaux des atomes du matériau cristallin étudié. Ces oscillations sont en réalité des phonons qui sont émis sous forme de lumière diffusée (ou rétrodiffusée si la lumière incidente ne peut traverser l'échantillon) dont les fréquences correspondent aux modes de vibration caractéristiques du matériau. Par spectroscopie micro-Raman, on mesure donc

l'intensité de la lumière diffusée (rétrodiffusée) en fonction de la fréquence de vibration.

Un schéma de principe de mesure par micro-Raman d'un échantillon, tel que le silicium, est donné sur la Figure IV.7.

L'échantillon (la plaque) est placé directement sur un support, sans subir de préparation particulière. Un faisceau laser d'argon Ar^+ ou de Krypton Kr^+ polarisé est dirigé vers l'échantillon le long de la normale à la plaque. Le diamètre du faisceau est en général de $1 \mu m$. Il pénètre dans l'échantillon sur une profondeur du substrat qui dépend de la longueur d'onde λ_i du faisceau: $0.3 \mu m$ pour $\lambda_i = 457.9 nm$ (Ar^+) [39]; $0.6 \mu m$ pour $\lambda_i = 514.5 nm$ (Ar^+) [39]; $0.9 \mu m$ pour $\lambda_i = 676 nm$ (Kr^+) [37]. Pour ces longueurs d'onde, le Si_3N_4 et le SiO_2 sont transparents: ils ne contribuent pas au signal Raman.

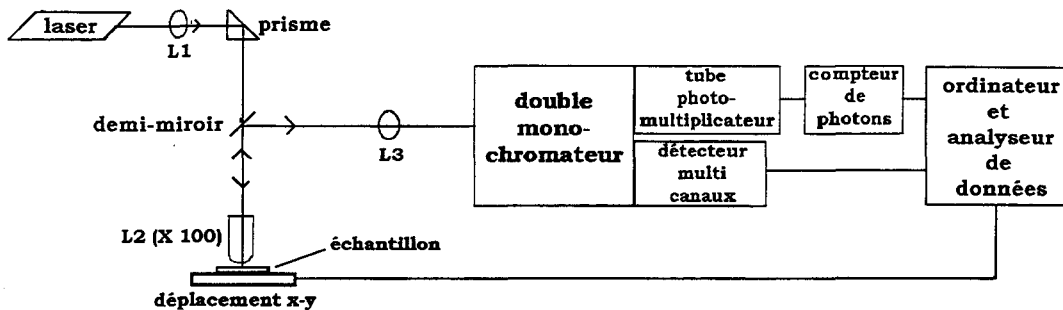


Figure IV.7 - Schéma de principe de l'appareil de mesure micro-Raman [37].

Les phonons induits par la lumière incidente sont émis et le faisceau rétrodiffusé correspondant, après avoir été dévié par un demi-miroir, est capté et analysé par un ensemble d'appareils (double monochromateur, photomultiplicateur, compteur de photons, détecteur multi-canaux). Enfin, le spectre micro-Raman, représentant l'intensité du faisceau en fonction de la fréquence de vibration ω est enregistrée par un ordinateur. L'échantillon est posé sur un support mobile: des spectres peuvent ainsi être enregistrés en différents points de la surface.

La Figure IV.8 présente un exemple de spectres obtenus pour: i) le silicium nu, non contraint (Bare Si substrate); ii) la zone du substrat située sous l'oxyde de champ (Field area) d'un LOCOS; iii) la zone du substrat située dans la zone active (Active area) d'un LOCOS. On appelle ω "fréquence", par abus de langage. Elle correspond en réalité à l'inverse de la longueur d'onde définie par $1/\lambda_r$, où λ_r est la longueur d'onde du faisceau rétrodiffusé. Ceci explique ses unités, en cm^{-1} . En réalité, pour obtenir la fréquence (en Herz) il suffit de multiplier ω par la célérité de la lumière.

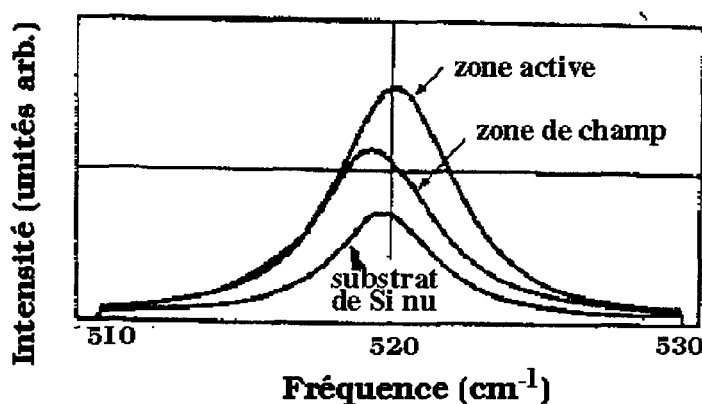


Figure IV.8 – Exemple de spectre micro-Raman pour un substrat de silicium nu, non contraint et pour deux positions situées dans les zones du substrat contraint situées sous l'oxyde de champ et la zone active d'un LOCOS [37].

Sur le graphe de la Figure IV.8, on observe que la position du pic se déplace suivant la zone inspectée. Ceci est dû aux effets des contraintes qui déforment le cristal, entraînant un déplacement de la fréquence d'oscillation maximale [42]. On définit $\omega_0 = 520\text{cm}^{-1}$ la fréquence d'oscillation pour le silicium non contraint, et ω la fréquence d'oscillation du silicium contraint. On déduit alors des spectres Raman le déplacement du pic par rapport au pic du silicium non contraint $\Delta\omega = \omega - \omega_0$ en fonction de l'abscisse à laquelle le spectre a été réalisé. Un déplacement positif ($\Delta\omega > 0$) indique la présence de contraintes compressives, tandis qu'un déplacement négatif ($\Delta\omega < 0$) indique la présence de contraintes tensiles. Les graphes représentant $\Delta\omega = f(x)$ (tels que celui de la Figure IV.9) donnent ainsi, par analogie le comportement des contraintes en fonction de la position.

D'après la théorie classique de la diffusion Raman, l'intensité du spectre s'exprime en fonction de la fréquence du faisceau diffusé (ou rétrodiffusé) et des "tenseurs de polarisabilité dérivés" [2]. Ces derniers décrivent la manière dont le cristal de silicium va vibrer. Ils dépendent des caractéristiques cristallographiques (symétrie cristalline) du silicium.

En présence de contraintes, la maille cristalline du silicium est déformée, ce qui a pour conséquence de modifier les tenseurs de polarisabilité dérivés qui s'expriment alors en fonction des déformations ($\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{zz}, \epsilon_{xy}, \epsilon_{xz}, \epsilon_{yz}$). Ainsi, l'intensité est liée à une fonction tensorielle complexe de composantes des déformations. On peut en déduire une relation entre le déplacement du pic $\Delta\omega$ et le tenseur des déformations [2]. Mais une estimation des valeurs des déformations indépendamment les unes des autres est pratiquement impossible.

Seul dans un cas les équations se simplifient suffisamment pour pouvoir alors relier directement $\Delta\omega$ à la composante en x des contraintes σ_{xx} [2]. Considérons par exemple une structure de type LOCOS oxydée ou non, dont le nitrure a une largeur $wnit > 4\mu m$. Alors, pour une abscisse x située à $wnit/2$, au milieu de la bande de nitrure, certaines composantes des contraintes peuvent être négligées [43]. Les équations se simplifient et l'on obtient la relation (IV.14). Celle-ci n'est valable que pour $wnit > 0.4\mu m$.

$$\Delta\omega(x = \frac{wnit}{2}) = -1.93 \cdot 10^{-9} \sigma_{xx} \quad (IV.14)$$

où $\Delta\omega(x = \frac{wnit}{2})$ est le déplacement en fréquence du pic et σ_{xx} est la composante en x de la contrainte.

Nous allons maintenant illustrer les mesures Raman en reprenant l'étude réalisée dans [39] sur une structure de type PBL non-oxydée, et en confrontant les valeurs de σ_{xx} mesurées à $x = \frac{wnit}{2}$ à celles que nous avons obtenues par simulations faites avec IMPACT-4.

ii) Mesures micro-Raman d'une structure de type PBL non-oxydée:

La structure PBL est une des structures d'isolement dont la fabrication a été décrite dans l'Introduction (section I.3.2). Des mesures micro-Raman ont été réalisées sur des structures de type PBL non oxydées, ayant des épaisseurs de nitrure et de piédestal d'oxyde variables (voir tableau IV.4), et une épaisseur de polysilicium de $0.05 \mu m$ [39]. La structure est large de $10\mu m$, et est constituée de bandes de Si_3N_4 de $5\mu m$ de large espacées de la même distance. Chaque structure a été mesurée en différents points de sa surface, selon la procédure détaillée dans le paragraphe précédent.

A titre d'exemple, sur la Figure IV.9 est représenté le spectre Raman ($\Delta\omega = f(x)$) d'une de ces structures. Un schéma de celle-ci est dessiné au dessus du graphe.

Sachant qu'en $x = wnit/2$, pour $wnit > 0.4\mu m$, on peut calculer directement les contraintes planes en x à partir de $\Delta\omega$ (équation (IV.14)), on a donc calculé σ_{xx} pour chaque structure.

Par ailleurs, σ_{xx} peut aussi être obtenue analytiquement, d'après Hu [43, 44], en fonction des caractéristiques du film de nitrure. Elle est alors exprimée par (IV.15).

$$\sigma_{xx} = -\frac{2\sigma_{(rés)}^{(f)} h_f}{\pi} \left(\frac{x^3}{(x^2 + z^2)^2} - \frac{(x - wnit)^3}{[(x - wnit)^2 + z^2]^2} \right) \quad (IV.15)$$

où $\sigma_{(rés)}^{(f)}$ est la contrainte du film, h_f l'épaisseur du film, w la largeur du film.

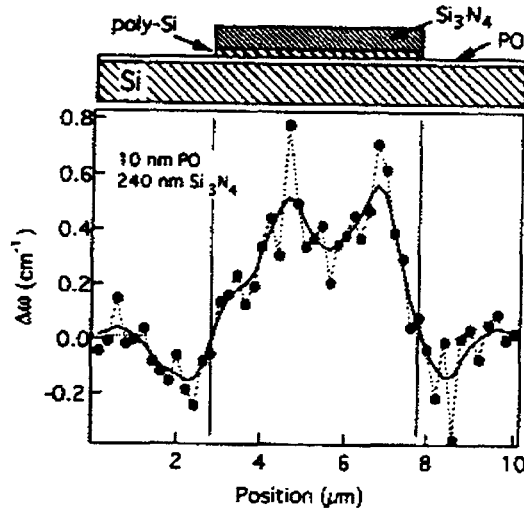


Figure IV.9 – Spectre micro-Raman d’une structure PBL non oxydée en fonction de la position x . La ligne en trait continu correspond au lissage des points expérimentaux reportés sur la courbe. Le schéma situé au dessus du graphe représente une des structures étudiées [39].

Enfin des simulations de ces structures ont été faites avec IMPACT-4 afin d’obtenir numériquement les contraintes générées dans le substrat dues aux contraintes intrinsèques et aux contraintes thermiques. Les valeurs des contraintes intrinsèques du nitrure et de l’oxyde de silicium ont été obtenues à partir des contraintes résiduelles mesurées par déflexion IV.2.2 a) avec un dispositif “Flexus”, à STMicroelectronics:

$$\text{nitrure : } 1.2 \cdot 10^{10} \pm 0.4 \cdot 10^{10} \text{ dynes/cm}^2 \quad (\text{IV.16})$$

$$\text{oxyde de silicium : } -3.2 \cdot 10^7 \pm 1 \cdot 10^9 \text{ dynes/cm}^2 \quad (\text{IV.17})$$

Quant au polysilicium, nous avons pris la valeur reportée dans l’article [18]: $-2 \cdot 10^9 \pm 0.4 \cdot 10^{10} \text{ dynes/cm}^2$.

Nous avons donc calculé, en $x = w/2$, les contraintes σ_{xx} à partir: i) des mesures micro-Raman (équation (IV.14)); ii) du modèle analytique de Hu (équation (IV.15)); iii) des simulations faites avec IMPACT-4. L’ensemble des résultats sont rassemblés dans le tableau IV.4.

On observe un assez bon accord entre les résultats mesurés, analytiques et simulés: la simulation est donc plutôt prédictive pour l’abscisse considérée.

$\frac{\text{épaisseur}(Si_3N_4) (\mu m)}{\text{épaisseur}(SiO_2) (\mu m)}$	0.150/0.014	0.150/0.010	0.240/0.014	0.240/0.010
$\Delta\omega$ (cm^{-1})	0.12	0.13	0.35	0.37
σ_{xx} mesuré ($dynes/cm^2$)	$-6.22 \cdot 10^8$	$-6.74 \cdot 10^8$	$-18.1 \cdot 10^8$	$-19.2 \cdot 10^8$
σ_{xx} analytique ($dynes/cm^2$)	$-6.5 \cdot 10^8$	$-6.5 \cdot 10^8$	$-19 \cdot 10^8$	$-19 \cdot 10^8$
σ_{xx} simulé ($dynes/cm^2$)	$-6.5 \cdot 10^8$	$-6.6 \cdot 10^8$	$-14 \cdot 10^8$	$-14.1 \cdot 10^8$

Tableau IV.4 – Confrontation de σ_{xx} mesuré, obtenu analytiquement et simulé avec IMPACT-4, à la position $wnit/2$ (centre du nitrure), pour quatre structures ayant des rapports épaisseur(Si_3N_4)/épaisseur(SiO_2) différents.

L'analyse par spectroscopie micro-Raman, en dehors de la position $x = wnit/2$, ne permet pas cependant de mesurer les contraintes individuellement. De plus, la résolution du faisceau d'argon utilisé est de $1 \mu m$, c'est à dire qu'il est de l'ordre de grandeur des structures d'isolement que nous désirons étudier (pitch de $1.45 \mu m$ et moins), ce qui n'est pas suffisamment précis. Il est donc nécessaire d'utiliser une autre méthode de mesure pour obtenir avec davantage de précision les niveaux des contraintes dans les structures d'isolement. Le CBED (Diffraction Electronique par Faisceau Convergent) est une technique utilisant un faisceau beaucoup plus étroit: $0.010 - 0.1000 \mu m$ [45]. De plus, elle permet d'obtenir les contraintes individuellement. Ce sont les raisons pour lesquelles nous nous y sommes intéressés.

IV.3 Mesures par diffraction électronique par faisceau convergent (CBED)

Une des techniques d'analyse très utilisée dans le domaine de la microélectronique est le TEM (Microscope Electronique à Transmission). Elle permet d'obtenir une quantité très importante d'informations, en ce qui concerne l'étude des défauts (densité, distribution), les analyses morphologiques ou microchimiques...

La Diffraction Electronique par Faisceau Convergent (CBED) est la technique de diffraction par TEM la plus ancienne. Elle fut développée par Kossel et Möllenstedt en 1939 [45, 46]. Son originalité se situe dans l'utilisation d'un rayon convergent, permettant d'analyser des structures ou des défauts cristallins de diamètre bien inférieur à $0.1 \mu m$. Un certain nombre d'informations

peut être obtenu par CBED: épaisseur de l'échantillon, les paramètres de maille, le système cristallographique et la symétrie 3D du crystal...

Depuis 1977 [47], le CBED a étendu le spectre d'informations structurales que l'on peut obtenir par analyse TEM. Il permet désormais l'étude des déformations des matériaux cristallins, avec une sensibilité de $10^{-4} - 10^{-3}$. Cette technique trouve un intérêt croissant pour la fabrication des composants électroniques. Elle permet de comprendre comment se forment les déformations au cours des étapes d'épitaxie d'implantation d'ions ou pour ce qui nous intéresse, au cours de l'oxydation thermique de champ.

C'est cette technique que nous avons utilisée pour mesurer les contraintes générées dans le substrat de différentes structures d'isolement, afin de confronter ces résultats avec ceux obtenus par simulation. Nous allons maintenant décrire son principe et les résultats obtenus.

IV.3.1 Préparation de l'échantillon

L'échantillon doit être épais de quelques milliers d'Angströms pour pouvoir être traversé par les électrons. La procédure de préparation de l'échantillon est identique à celle pour le TEM. Elle suit les étapes de collage, sciage, ponçage mécanique jusqu'à $10 \mu m$ d'épaisseur, et gravure par faisceau d'ions jusqu'à perforation [48] [49]. L'échantillon est affiné le long du plan perpendiculaire à la plaque et aux bandes de nitrure.

IV.3.2 Appareillage et principe de la mesure

Le rayon utilisé en CBED est convergent et plutôt étroit: entre 0.010 et $0.100 \mu m$ de diamètre. Un schéma de principe se trouve Figure IV.10.

L'échantillon préparé comme précédemment décrit est placé sur un porte échantillon entre les deux lentilles objectives, sous un vide de $2.7 \cdot 10^{-5} Pa$, et est refroidi à la température de l'azote liquide, afin d'éviter les effets thermiques sur les mesures. Le faisceau arrivant sur l'échantillon est obtenu à l'aide de lentilles jumelles (TWIN lens). Il est obtenu en mode nanoprobe, et non microprobe, par chauffage d'un filament.

Le mode nanoprobe permet d'obtenir un faisceau convergent de quelques nanomètres de diamètre, tandis que le mode microprobe donne un faisceau parallèle cohérent de quelques microns de diamètre. Pour obtenir l'un ou l'autre mode, il suffit d'allumer (mode microprobe) ou d'éteindre (mode nanoprobe) une lentille minicondensateur. Ces deux modes sont représentés sur

la Figure IV.11.

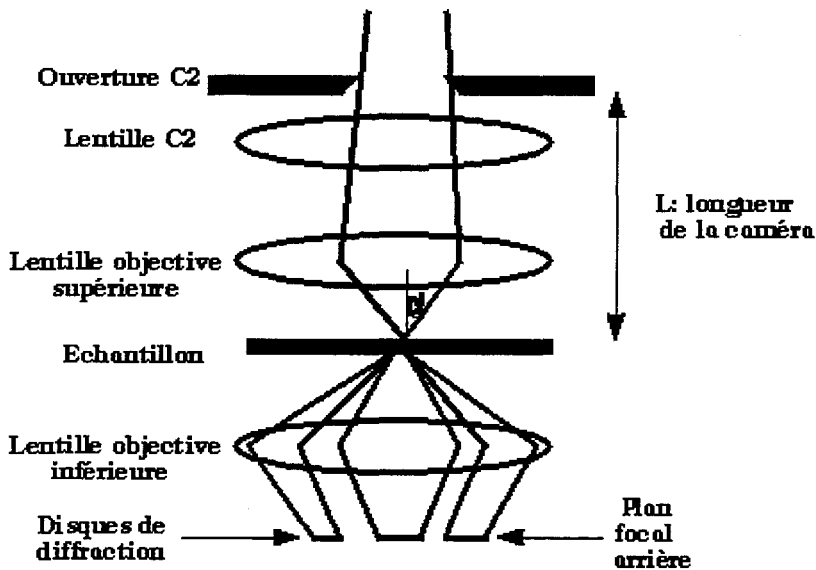


Figure IV.10 – Schéma de principe d'obtention des figures CBED (Diffraction Electronique par Faisceau Convergent). En mode "nanoprobe", le rayon convergent, traversant l'échantillon, vient former la figure de diffraction sur des disques situés sur le plan focal arrière de la lentille objective [45].

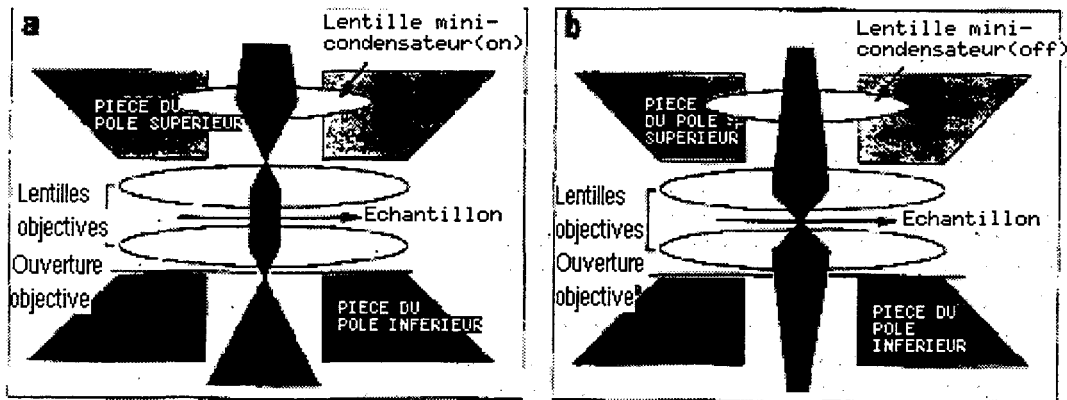


Figure IV.11 – Schéma de lentilles jumelles [50]. a) Le minicondensateur est allumé: le faisceau est condensé vers le point focal du minicondensateur, ceci permettant d'obtenir une illumination cohérente (faisceau parallèle) de l'échantillon. b) Le minicondensateur est éteint: le faisceau convergent arrive avec un diamètres de quelques dizaines de nanomètres, sur la surface de l'échantillon.

Pour obtenir une figure CBED, quatre variables du microscope doivent être ajustées, sur la Figure IV.10:

- le demi angle de convergence du faisceau, α : Il peut être réglé par l'in-

termédiaire de l'ouverture C2. Il doit être suffisamment étroit pour que les figures de diffraction soient bien définies. On opère avec une faible ouverture du faisceau pour obtenir α inférieur à quelques milliradians.

- la longueur L de la camera: L contrôle l'agrandissement de la figure de diffraction. Les figures ne doivent cependant pas être trop grandes pour maintenir la précision des informations observées. On opère avec un L petit: inférieur à 500mm.
- la focalisation: Elle se fait en ajustant le courant de la lentille C2.
- la taille du faisceau: Il est obtenu en faisant varier le courant de la lentille C1. Il doit être suffisamment étroit pour étudier de petits domaines.

Le porte-échantillon peut s'incliner, afin d'orienter l'échantillon selon un certain axe cristallographique. Les figures de diffraction sont recueillies en photographiant les disques lumineux obtenus.

IV.3.3 Les figures de diffraction

Par diffraction électronique, nous pouvons obtenir des informations sur des zones différentes du réseau réciproque nommées la "ZOLZ" et les "HOLZ". Nous allons définir ces deux zones, et expliquer comment les figures de diffractions les décrivent.

a) La ZOLZ (Zone de Laue d'Ordre Zéro)

Sur la Figure IV.12 sont représentées les figures de diffraction dans le cas d'une diffraction avec un faisceau parallèle (a)), et un faisceau convergent (b)), obtenues sur le plan focal arrière de la lentille objective.

La figure de diffraction ci-dessous est celle de la ZOLZ, ou Zone de Laue d'Ordre Zero. Elle correspond à la figure de diffraction du premier plan réticulaire rencontré par le faisceau incident, perpendiculaire à ce qui est appelé "l'axe de zone". L'axe de zone est la direction cristallographique de l'échantillon le long de laquelle arrive le rayon incident.

Le point (ou disque) central, le plus lumineux, correspond au rayon transmis, non diffracté, c'est à dire celui qui arrive parallèlement à ce qui est appelé "l'axe de zone". On lui attribue l'indice [000].

Le rayon incident va arriver sur les plans réticulaires du matériau en faisant un angle θ par rapport à la normale au plan. S'il satisfait certaines conditions (appelées conditions de Bragg), il est alors diffracté par le plan

avec un angle θ . Le faisceau diffracté va alors arriver au niveau du plan focal, avec une certaine orientation, laissant la trace d'un point ou d'un disque lumineux. Pour chacun d'entre eux, les indices hkl du plan réticulaire de diffraction peuvent être attribués.

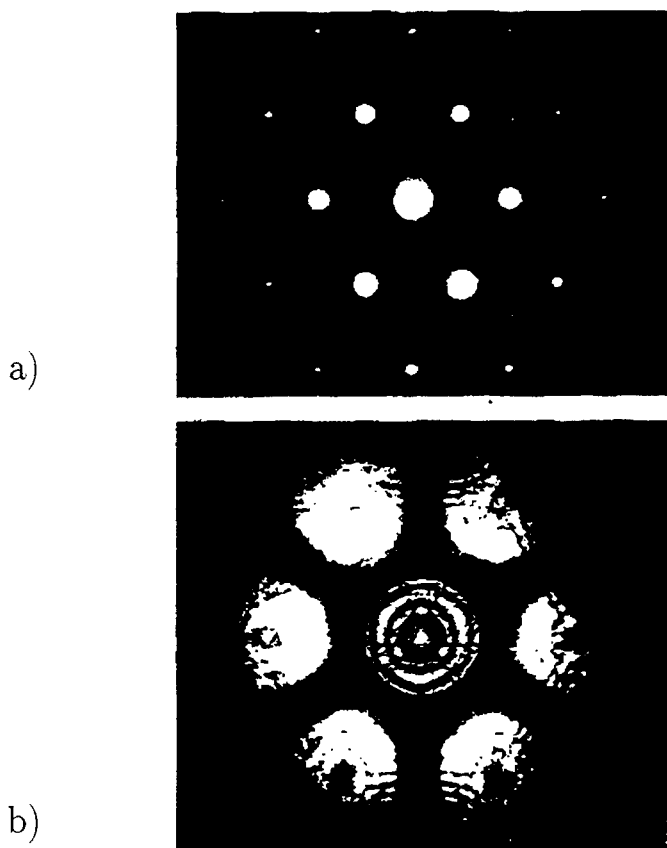


Figure IV.12 – Figures de diffraction obtenues pour un substrat pur de silicium [111]: a) Figure obtenue par un faisceau parallèle: elle est constituée de maxima de forte intensité. b) Figure obtenue par faisceau convergent (CBED), sur une région beaucoup plus étroite: elle est constituée de disques lumineux à l'intérieur desquels et entre lesquels des lignes et d'autres détails peuvent être vus [45].

Cependant, la diffraction électronique ne peut se faire sur tous les plans: il existe des conditions d'extinctions (pour lesquelles la diffraction ne peut se faire, et le point lumineux correspondant s'éteint) qui dépendent du système de symétrie du cristal et de la zone de Laue étudiée. Pour la ZOLZ, les seules diffractions sur les plan hkl permises doivent satisfaire la relation de la loi

de la zone de Weiss:

$$hU + kV + lW = 0 \tag{IV.18}$$

où (hkl) sont les indices du plan de diffraction, et [UVW] sont les indices de l'axe de zone.

A partir de cette relation et connaissant le système de symétrie du cristal (structure cristallographique de symétrie cubique face centrée, hexagonale, cubique simple, etc...), nous pouvons "indexer" la figure de diffraction. "Indexer" signifie attribuer à chaque point (ou disque) lumineux le plan cristallographique (hkl) auquel il se rapporte. L'indexation permet ensuite de déterminer la distance (soient les paramètres réticulaires a, b, c) et les angles (soient α, β, γ) entre les différents plans cristallins.

Sur la Figure IV.13 se trouve le schéma de la figure de diffraction que l'on obtient pour un matériau de type cfc (Cubique Face Centré). Les réflexions selon les trois axes de zone [001] (a), [110] (b) et [111] (c) sont représentées. Les croix correspondent aux réflexions interdites (pour lesquelles il n'y aura pas de points lumineux), et les points, les réflexions permises (pour lesquelles il y aura un point lumineux). L'indice [000] correspond à celui du rayon incident.

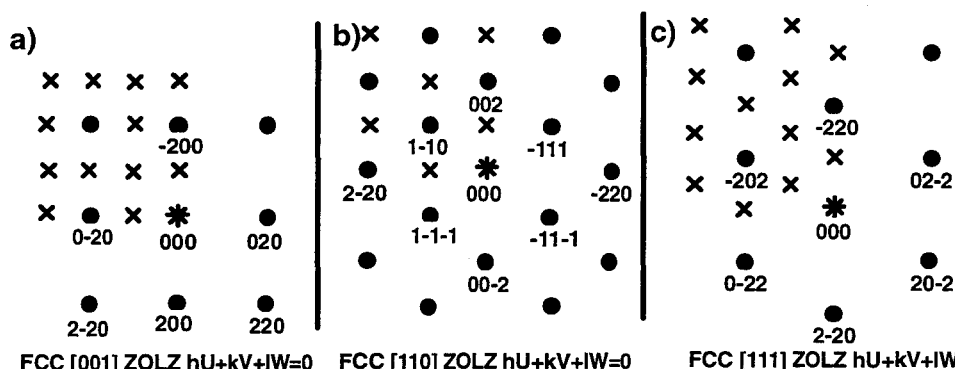


Figure IV.13 – La réflexion ZOLZ autorisée pour les trois axes principaux de la structure cubique face centrée (cfc). Les réflexions permises sont des points, celles interdites sont des croix, et la direction du faisceau direct est une étoile.

b) Les HOLZ (Zones de Laue de Haut Ordre)

Les HOLZ sont les réflexions sur zones de Laue d'ordre supérieur à zéro (haut ordre). Il existe ainsi la FOLZ (Zone de Laue de Premier Ordre), la

SOLZ (Zone de Laue de Second Ordre), etc... Nous allons maintenant expliquer ce que sont les HOLZ, et comment elles sont obtenues.

La diffraction, en réalité, permet de transformer l'espace des dimensions du réseau cristallin en un espace des fréquences, projeté sur le plan focal de la lentille objective. Plus précisément, la figure de diffraction que nous obtenons est la transformée de Fourier du réseau direct, c'est à dire du réseau cristallin du matériau. Ce réseau transformé est appelé le réseau réciproque.

Considérons le vecteur \vec{g} tel que sa norme soit la distance entre un point du réseau réciproque (ou de la figure de diffraction) et le point du faisceau direct. On associe à ce point du réseau réciproque un plan d'indices (hkl) . La distance $|g|$ est proportionnelle en réalité à l'inverse de la distance d entre les plans (hkl) correspondants dans le réseau direct: $|g| = K/d$ (où K est la constante du microscope, fonction de la longueur de la caméra). C'est pour cette raison que les distances entre les différents plans peuvent être déduites des images de diffraction. De même pour les angles: l'angle entre deux points et l'axe de zone dans le réseau réciproque donne l'angle entre les deux plans auxquels les plans correspondent dans le réseau réciproque.

Dans le réseau réciproque, on définit une sphère telle que son rayon soit $r = 1/\lambda$, où λ est la longueur d'onde employée du faisceau. Cette sphère est la sphère d'Ewald. Elle est telle que l'intersection de cette sphère avec le réseau réciproque donne la figure de diffraction: tous les points du réseau réciproque touchant la sphère d'Ewald sont un point lumineux sur la figure de diffraction. Afin de mieux comprendre, un schéma explicatif, montrant le réseau réciproque, la sphère d'Ewald et la figure de diffraction correspondante, est donné à la Figure IV.14.

Au centre de la Figure (c)), il existe une zone très dense en points lumineux. Elle correspond à l'intersection de la sphère d'Ewald avec le plan du réseau réciproque tangent. Ce plan tangent est la Zone de Laue d'Ordre Zero ou ZOLZ, dont nous avons déjà parlé précédemment. Il y a autour de cette zone un cercle constitué de points lumineux. Il correspond à l'intersection de la sphère d'Ewald avec les points du plan situé au dessus du plan de la ZOLZ, ou encore de la Zone de Laue de Premier Ordre (FOLZ). La FOLZ coupe la sphère d'Ewald, contrairement à la ZOLZ qui en est tangente. Ce premier anneau est appelé FOLZ, car les diffractions permises doivent satisfaire la relation:

$$hU + kV + lW = 1 \quad (\text{IV.19})$$

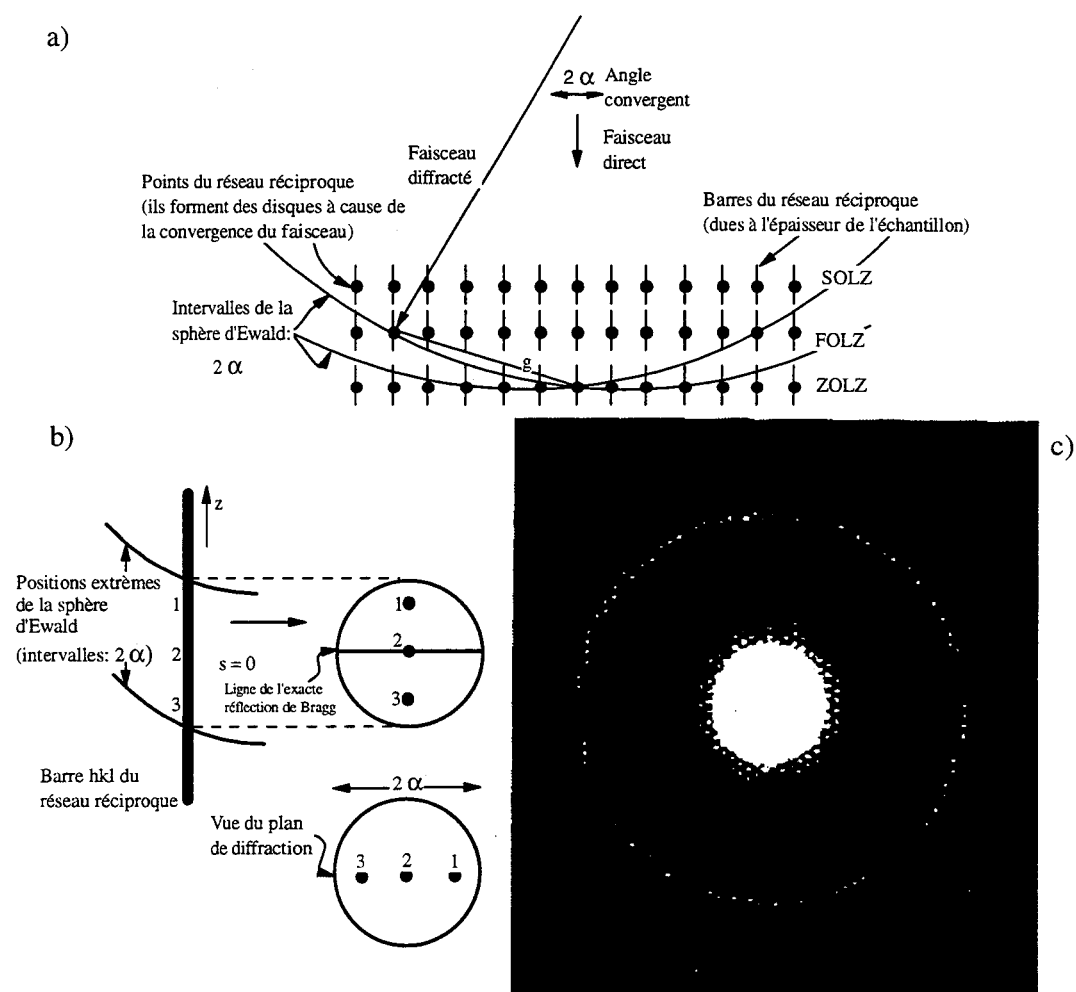


Figure IV.14 – a) La sphère d'Ewald coupe le réseau réciproque de plans non parallèles au faisceau d'électrons et dont les vecteurs \vec{g} ne sont pas normaux au faisceau. La sphère a une épaisseur effective de 2α à cause de la convergence du faisceau, et par cela intercepte un certain nombre de points des HOLZ du réseau réciproque (FOLZ, SOLZ...). Le plan tangent à la sphère est la ZOLZ. b) Les barres du réseau réciproque dues à l'épaisseur de l'échantillon ont la forme décrite Figure b), et l'intensité des points spécifiques "s" de ces barres sont représentés dans les disques hkl. c) L'intersection entre la sphère d'Ewald et les HOLZ sont des anneaux: ici se trouve la figure de diffraction de la ZOLZ et de la FOLZ (Zone de Laue du Premier Ordre).

Sur les figures de diffraction, elles fournissent des informations tri-dimensionnelles. Leur indexation s'effectue comme pour les ZOLZ. Quelques exemples d'indexations sont rapportés Figure IV.15.

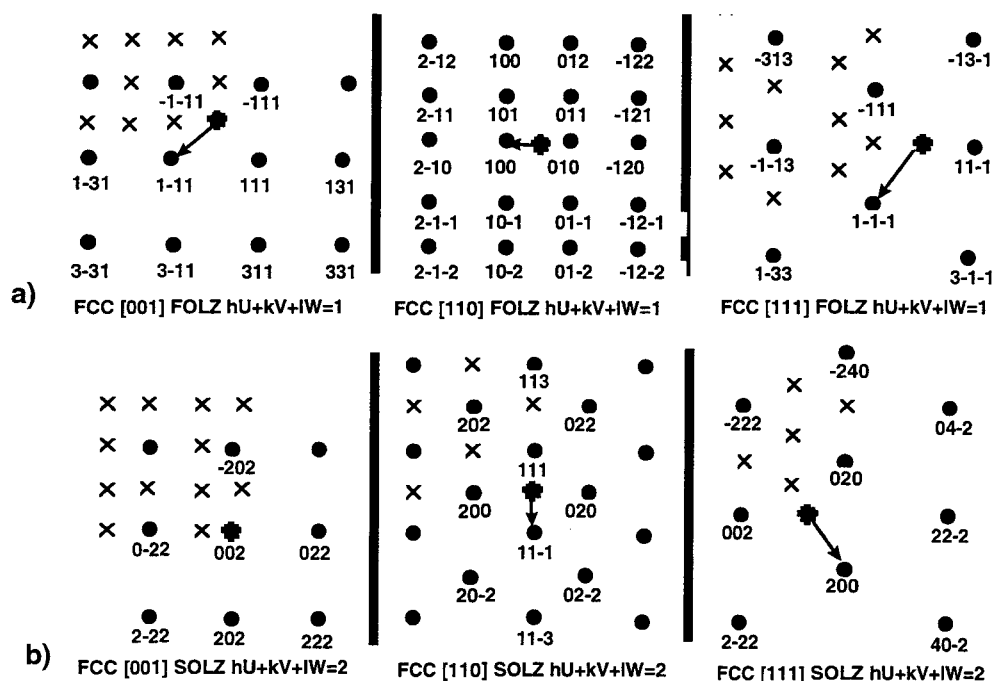


Figure IV.15 – Les réflexions de la FOLZ et de la SOLZ autorisées pour les trois axes principaux de la structure fcc. Les réflexions permises sont des points, celles interdites sont des croix, et la direction du faisceau direct est une étoile. La flèche indique le vecteur de déplacement entre la ZOLZ et la FOLZ.

c) Les lignes des HOLZ

Sur les figures de diffraction réalisées avec un faisceau convergent, des lignes sombres sont visibles dans le disque central de la ZOLZ, et seulement dans ce disque là. Ce sont les lignes de déficit des HOLZ. Sur la Figure IV.16, la relation entre les lignes de HOLZ et les points des HOLZ est représentée.

Leur origine et leur présence dans le disque central est facilement compréhensible si on sait comment les HOLZ sont générées. Lorsqu'une partie des électrons du faisceau sont en condition de Bragg, et que la diffraction est permise, alors ils diffractent dans la direction d'indice correspondante. Donc les électrons qui satisfont ces conditions ne sont plus transmis et ne sont plus visibles dans le faisceau transmis (correspondant au disque d'indice 000). Il se forme alors des zones sombres, les lignes de déficience des HOLZ, qui correspondent aux directions incidentes des électrons qui sont en condition de Bragg pour des indices de diffraction d'ordre supérieur. Ainsi, l'indexation

des lignes des HOLZ se fait à l'aide de la figure de diffraction contenant aussi les disques des HOLZ.

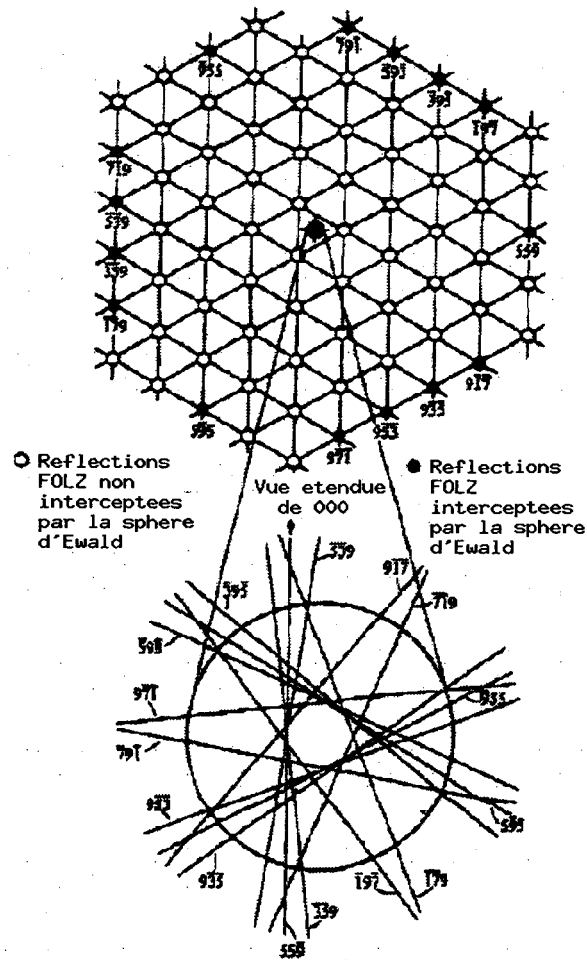


Figure IV.16 – Relation entre les lignes des HOLZ et les maxima des HOLZ. Les réflexions de la FOLZ de cette configuration [111] sont indexées et représentées par les cercles pleins. Les autres points du réseau réciproque qui ne coupent pas la sphère d'Ewald sont représentés par des cercles vides. Le vecteur \vec{g} allant du disque 000 à chaque disque hkl de la FOLZ est normal à la ligne hkl de la HOLZ. Les lignes sont dessinées, au-dessous, dans le disque 000 agrandi.

L'intérêt d'utiliser des HOLZ de haut rang est la sensibilité avec laquelle les lignes vont se déplacer, en fonction des déformations par exemple. Mais elles sont moins facilement visibles sur les figures.

Sur la Figure IV.17, deux exemples de photos de figures de diffraction sont reportées. Elles ont été obtenues pour un échantillon de silicium a) non-déformé et b) déformé. L'axe de zone choisi est la direction [310]. La zone

de Laue des HOLZ est la seconde. On peut aussi deviner les lignes de la quatrième zone de Laue: ce sont les lignes très claires situées sous les lignes foncées.

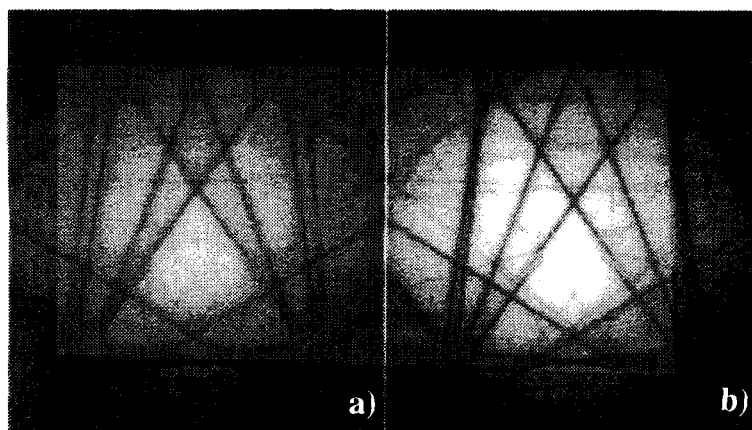


Figure IV.17 – *Figures de diffraction représentant les HOLZ de la seconde zone de Laue pour un substrat de silicium a) non-déformé et b) déformé.*

On observe nettement que les lignes des HOLZ de la figure b) se sont déplacées par rapport à celles de la figure a). Ce sont les déformations présentes dans le substrat qui en sont responsables. Les lignes des HOLZ se déplacent très facilement en présence des déformations, et leur déplacement est proportionnel aux valeurs des déformations. On a ainsi une méthode qui permet en mesurant le déplacement des lignes, d'en déduire les valeurs des déformations du substrat et de calculer les contraintes correspondantes.

La méthode de mesure des déformations par CBED a été largement documentée par Humphreys et al [51] et par Cherns and Preston [52].

IV.3.4 Mesure des déformations; calcul des contraintes

a) Mesure des déformations

La position des lignes de HOLZ est très sensible à de petites variations du paramètre de maille (ou déformation du réticule) et de la tension d'accélération du microscope. Afin de quantifier avec précision les variations du paramètre de maille entre l'échantillon sans déformations et celui avec déformations, il est nécessaire de calibrer la tension d'accélération à l'aide d'un échantillon de silicium non contraint. Un programme de simulation créé par Stadelmann [53] [54], fondé sur l'approximation cinématique, est utilisé. Il

permet de calculer la position des lignes des HOLZ en fonction des paramètres de maille du matériau et de la tension d'accélération.

La tension d'accélération effective V_0 est déterminée à l'aide de la mesure CBED d'un échantillon de silicium parfait, et en variant ce paramètre dans la simulation jusqu'à obtenir la meilleure superposition possible des lignes calculées avec celles de la mesure. Dans les calculs, le paramètre de maille du silicium est fixé à: $a_0 = 0.54288nm$, valeur pour un échantillon à $-173^\circ C$.

Puis supposant cette valeur V_0 valable pour l'échantillon contraint, la même procédure est appliquée pour les mesures CBED, en fixant cette fois V_0 et en faisant varier a_0 , jusqu'à obtenir le paramètre de maille de l'échantillon contraint et en déduire la déformation ϵ ($\epsilon = \frac{a-a_0}{a_0}$) correspondante dans chaque direction.

Des déformations de $2 \cdot 10^{-4}$ peuvent être mesurées à partir du déplacement des lignes de HOLZ. Les six paramètres de maille caractérisant le silicium (les trois paramètres réticulaires a , b et c , et les angles α , β et γ entre les plans cristallins principaux) peuvent être obtenus à partir d'une seule figure simulée des lignes de HOLZ, la position de chaque ligne dépendant d'eux. Cependant, à cause de la dégradation expérimentale des lignes de HOLZ, ce nombre est réduit à trois ou quatre, pour les figures CBED réelles, dépendant de la qualité de la figure, de l'axe de zone et de la méthode de calibration [48].

A partir de ces figures de diffraction, le tenseur des déformation peut être calculé avec une grande précision [55]. Mais à cause de l'amincissement de l'échantillon, un relâchement des tensions le long de la direction d'amincissement peut avoir lieu. La conséquence peut être une possible modification du champ de déformation par rapport à l'échantillon massif. Ce relâchement, calculé, ne devrait pas être supérieur à 28% [56].

b) Calcul des contraintes à partir des déformations

Pour un matériau élastique, de maille cubique, tel que le silicium, soumis à des déformations, la relation entre le tenseur des contraintes σ_{ij} et le tenseur des déformations ϵ_{kl} est obtenue à partir de la théorie élastique. Les indices i, j, m , et n peuvent prendre les valeurs 1, 2 ou 3, qui sont associées aux directions x (1), y (2) et z (3). La loi de Hooke généralisée relie ϵ_{ij} et σ_{mn} par des tenseurs du quatrième ordre:

- le tenseur des rigidités $[C_{ijmn}]$ tel que: $\sigma_{ij} = C_{ijmn}\epsilon_{mn}$,

– le tenseur des compliances ou souplesses $[S_{ijmn}]$ tel que: $\epsilon_{mn} = S_{ijmn}\sigma_{ij}$

Les composantes de ces tenseurs sont appelées les constantes élastiques, et sont fonction du module d'Young E et du coefficient de Poisson ν . Elles sont dépendantes du repère choisi et l'on travaille généralement dans le repère associé aux axes de symétrie du système. Les notations des indices ij , ou mn sont allégées en utilisant les notations de Voigt:

$$\begin{array}{ll} 11 \rightarrow 1 & 23,32 \rightarrow 4 \\ 22 \rightarrow 2 & 13,31 \rightarrow 5 \\ 33 \rightarrow 3 & 12,21 \rightarrow 6 \end{array}$$

Le tenseur de rigidité est alors écrit:

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2\mu + \lambda & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & 2\mu + \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & 2\mu + \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{bmatrix} \quad (\text{IV.20})$$

où $\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$ et $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$ sont les coefficients de Lamé, exprimés en fonction du module d'Young E et du coefficient de Poisson ν du silicium.

Le tenseur des souplesses s'exprime, lui par:

$$\begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E} & \frac{-\nu}{E} & \frac{-\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu}{E} & \frac{1}{E} & \frac{-\nu}{E} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-\nu}{E} & \frac{-\nu}{E} & \frac{1}{E} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{E} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{E} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2(1+\nu)}{E} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.21})$$

Résolvons le système dans le cas d'une bande de nitrure infinie déposée sur un piédestal d'oxyde.

c) Résolution du système pour une structure LOCOS non oxydée

Sur la Figure IV.18 est schématisée une structure de type LOCOS non oxydé. Elle correspond à la première structure qui a été mesurée, par CBED, par le LAMEL. Elle a une largeur de $4.37 \mu m$, le nitrure a une largeur et une épaisseur respectivement de $0.87 \mu m$ et $0.194 \mu m$, le piédestal d'oxyde a une épaisseur de $0.087 \mu m$.

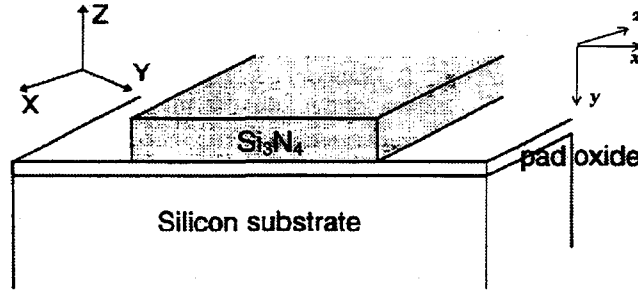


Figure IV.18 – Première structure étudiée par CBED, pour STMicronics, au Laboratoire LAMEL (CNR, Bologne, Italie): bande de nitrure, de $0.194 \mu\text{m}$ d'épaisseur et de $0.87 \mu\text{m}$ de large, déposée sur un piédestal d'oxyde de $0.021 \mu\text{m}$ d'épaisseur. Sur le schéma sont indiqués: i) à la fois le système d'axes de l'échantillon TEM (XYZ) et ii) celui de la fabrication (xyz) (qui est aussi celui de la simulation).

Pour résoudre le système, deux cas sont étudiés:

– **Cas où la structure n'est pas amincie le long de z:**

Dans ce cas, la déformation le long de l'axe z ϵ_{zz} est nulle. L'échantillon se trouve en déformations planes où $\epsilon_{zz} = \epsilon_{xz} = \epsilon_{yz} = 0$. On obtient les équations (IV.22) en résolvant la loi de Hooke généralisée:

$$\begin{aligned}\epsilon_{xx} &= \frac{1+\nu}{E} [(1-\nu)\sigma_{xx} - \nu\sigma_{yy}] \\ \epsilon_{yy} &= \frac{1+\nu}{E} [(1-\nu)\sigma_{yy} - \nu\sigma_{xx}] \\ \epsilon_{xy} &= \frac{1+\nu}{E} \sigma_{xy}\end{aligned}\quad (\text{IV.22})$$

où $\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}$ sont respectivement les déformations planes le long des axes x et y; ϵ_{xy} sont les déformations de cisaillement le long de xy; σ_{xx}, σ_{yy} sont respectivement les contraintes planes le long des axes x et y; σ_{xy} sont les contraintes de cisaillement le long de xy.

– **Cas où la structure est aminci le long de z:**

C'est le cas des échantillons TEM, où la dimension le long de z est comparable à celle de l'épaisseur du film de nitrure: les contraintes le long de z sont alors nulles. L'échantillon se trouve en contraintes planes, où $\sigma_{zz} = \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0$. La résolution de la loi Hooke généralisée donne alors les équations (IV.23).

$$\begin{aligned}
 \epsilon_{xx} &= \frac{1}{E}(\sigma_{xx} - \nu\sigma_{yy}) = S_{11}\sigma_{xx} + S_{12}\sigma_{yy} \\
 \epsilon_{zz} &= \frac{-\nu}{E}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) = -S_{12}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \\
 \epsilon_{yy} &= \frac{1}{E}(\sigma_{yy} - \nu\sigma_{xx}) = S_{12}\sigma_{xx} + S_{11}\sigma_{yy} \\
 \epsilon_{xy} &= \frac{(1 + \nu)}{E}\sigma_{xy} = S_{44}\sigma_{xy} \\
 \epsilon_{xz} &= \epsilon_{yz} = 0
 \end{aligned} \tag{IV.23}$$

Les valeurs des paramètres de souplesse sont calculées pour une orientation du substrat 100 et une direction cristallographique dans le plan du substrat $\langle 001 \rangle$. Leur valeurs sont: $S_{11} = 0.768 \cdot 10^{-12} \text{cm}^2/\text{dyn}$, $S_{12} = -0.214 \cdot 10^{-12} \text{cm}^2/\text{dyn}$, $S_{44} = 1.27 \cdot 10^{-12} \text{cm}^2/\text{dyn}$.

Le système de référence du CBED est le système cristallographique: $X=[100]$, $Y=[010]$ et $Z=[001]$. Celui de la fabrication, et donc celui de la simulation, est: $x=[\bar{1}10]$, $y=[001]$ et $z=[110]$. Ils sont tous les deux indiqués sur la Figure IV.18. Pour pouvoir comparer les résultats des mesures obtenus par CBED et ceux obtenus par la simulation, il faut trouver une relation qui exprime les contraintes obtenues par CBED (les indices sont écrits en lettres capitales) en fonction des contraintes calculées dans le système de référence de la fabrication (les indices sont en lettres minuscules). La relation s'obtient en effectuant une rotation autour des axes Z et X . La matrice de rotation appliquée au système du CBED permet d'obtenir les relations suivantes:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{XX} &= \frac{\sigma_{xx}}{2} + \frac{\sigma_{zz}}{2} - \sigma_{xz} = \frac{\sigma_{xx}}{2} \\
 \sigma_{YY} &= \frac{\sigma_{xx}}{2} + \frac{\sigma_{zz}}{2} + \sigma_{xz} = \frac{\sigma_{xx}}{2} \\
 \sigma_{ZZ} &= \sigma_{yy} \\
 \sigma_{XY} &= \frac{\sigma_{xx}}{2} - \frac{\sigma_{zz}}{2} = \frac{\sigma_{xx}}{2} \\
 \sigma_{YZ} &= \frac{\sigma_{yz}}{\sqrt{2}} + \frac{\sigma_{xy}}{\sqrt{2}} = \frac{\sigma_{xy}}{\sqrt{2}} \\
 \sigma_{XZ} &= -\frac{\sigma_{yz}}{\sqrt{2}} + \frac{\sigma_{xy}}{\sqrt{2}} = \frac{\sigma_{xy}}{\sqrt{2}}
 \end{aligned} \tag{IV.24}$$

Nous supposons toujours que nous sommes en conditions de contraintes planes. Nous pouvons alors déduire de (IV.23) et de (IV.24) la relation entre les déformations mesurées par le CBED et les contraintes calculées par la simulation:

$$\begin{aligned}
\epsilon_{XX} &= \epsilon_{YY} = (S_{11} + S_{12}) \frac{\sigma_{xx}}{2} + S_{12} \sigma_{yy} \\
\epsilon_{ZZ} &= S_{12} \sigma_{xx} + S_{11} \sigma_{yy} \\
\epsilon_{XY} &= \frac{\Delta\gamma}{2} = \frac{-S_{44}}{2} \sigma_{xx} \\
\epsilon_{XZ} &= -\epsilon_{YZ} = -S_{44} \frac{\sigma_{xy}}{2\sqrt{2}}
\end{aligned} \tag{IV.25}$$

La Diffraction Electronique par Faisceau Convergent (CBED) que nous venons de décrire est une méthode plus précise que le Raman, puisque le faisceau incident a un diamètre de quelques centaines d'Angströms (au lieu d'environ $1 \mu m$ pour le Raman). Des déformations de $2 \cdot 10^{-4}$ peuvent aussi être mesurées indépendamment les unes des autres, ce qui permet de calculer les contraintes indépendamment. Ce sont les raisons pour lesquelles nous avons préféré l'utiliser pour mesurer les contraintes dans le substrat. Deux échantillons préparés à STMicroelectronics ont été mesurés par le laboratoire LAMEL de Bologne, Italie, une structure de type LOCOS non oxydée et une structure de type LOCOS enterré de largeur $1.75 \mu m$. Notre but étant d'étudier la prédictivité d'IMPACT-4 en ce qui concerne les contraintes, nous avons confronté ces mesures avec les simulations. Les résultats expérimentaux vont être présentés dans la section suivante.

IV.4 Mesure des contraintes par CBED

Deux structures ont été fabriquées et les contraintes ont été mesurées en certains points par la méthode CBED (Diffraction Electronique par Faisceau Convergent). La première est une structure de type LOCOS non oxydée: une bande de nitrure déposée sur un piédestal d'oxyde de silicium, obtenu par oxydation thermique du substrat de silicium. L'autre est un LOCOS enterré oxydé, dont les dimensions sont semblables à celles de la structure non oxydée. Ces mesures ont été confrontées avec les contraintes calculées par simulation, avec IMPACT-4 [3] et SUPREM-IV [32], en utilisant les paramètres calibrés dans le Chapitre II.

Les mesures présentées dans cette section ont été réalisées en utilisant un Philips CM30 TEM, opérant à 100kV et gardant l'échantillon à une température d'environ 100K pendant les analyses, afin d'optimiser la visibilité des figures de diffraction que l'on obtient. Une résolution spatiale de $0.015 \mu m$ est estimée en tenant compte de l'aberration sphérique du système d'illumination et de l'élargissement du faisceau, en accord avec un modèle de diffusion élastique simple [57].

IV.4.1 Etude des contraintes générées par une bande de nitrure

a) Mesures par CBED

Ce travail a été présenté au GADEST'97 (Gettering and Defect Engineering in Semiconductor Technology) [11].

Abscisse x (μm)	Ordonnée y (μm)	Déformations		Contraintes (dynes/cm^2)	
		ϵ_{XX}	ϵ_{ZZ}	σ_{xx}	σ_{yy}
1.69	0.130	ϵ_{XX}	$5.5 \cdot 10^{-4}$	σ_{xx}	$2.97963 \cdot 10^{+9}$
		ϵ_{ZZ}	$3.5 \cdot 10^{-4}$	σ_{yy}	$1.2861 \cdot 10^{+9}$
		ϵ_{XZ}	$2.5 \cdot 10^{-4}$	σ_{xy}	$1.11355 \cdot 10^{+9}$
2.13	0.200	ϵ_{XX}	$-7 \cdot 10^{-4}$	σ_{xx}	$-3.66986 \cdot 10^{+9}$
		ϵ_{ZZ}	$-3.5 \cdot 10^{-4}$	σ_{yy}	$-1.47843 \cdot 10^{+9}$
		ϵ_{XZ}	0	σ_{xy}	0
1.59	0.220	ϵ_{XX}	$-0.088 \cdot 10^{-4}$	σ_{xx}	$0.2 \cdot 10^{+9}$
		ϵ_{ZZ}	$1.88 \cdot 10^{-4}$	σ_{yy}	$0.3 \cdot 10^{+9}$
		ϵ_{XZ}	$1.8 \cdot 10^{-4}$	σ_{xy}	$0.4 \cdot 10^{+9}$
2.18	0.220	ϵ_{XX}	$-1.8 \cdot 10^{-4}$	σ_{xx}	$-1.53 \cdot 10^{+9}$
		ϵ_{ZZ}	$-5.5 \cdot 10^{-4}$	σ_{yy}	$-1.14 \cdot 10^{+9}$
		ϵ_{XZ}	$0.225 \cdot 10^{-4}$	σ_{xy}	$0.05 \cdot 10^{+9}$
2.31	0.220	ϵ_{XX}	$-0.063 \cdot 10^{-4}$	σ_{xx}	$-0.95 \cdot 10^{+9}$
		ϵ_{ZZ}	$-7.18 \cdot 10^{-4}$	σ_{yy}	$-1.2 \cdot 10^{+9}$
		ϵ_{XZ}	$0.225 \cdot 10^{-4}$	σ_{xy}	$0.05 \cdot 10^{+9}$
2.65	0.230	ϵ_{XX}	$5.5 \cdot 10^{-4}$	σ_{xx}	$2.749 \cdot 10^{+9}$
		ϵ_{ZZ}	$1.7 \cdot 10^{-4}$	σ_{yy}	$0.987 \cdot 10^{+9}$
		ϵ_{XZ}	$-1.75 \cdot 10^{-4}$	σ_{xy}	$-0.779 \cdot 10^{+9}$

Tableau IV.5 – Résultats des mesures des déformations dans le substrat de silicium, et dans le système de référence du CBED (XYZ), faites par CBED sur une structure de type LOCOS non oxydée. Les contraintes correspondantes ont été calculées pour le système de référence de la fabrication (xyz). Ces mesures ont été obtenues par le laboratoire LAMEL, du CNR de Bologne, en Italie.

Une structure identique à celle représentée sur la Figure IV.18 a été fabriquée. Sur un substrat de silicium $\langle 001 \rangle$, un piédestal d'oxyde de $0.021 \mu\text{m}$ est créé thermiquement en présence d'oxygène, à 920°C . Un film de Si_3N_4 , de $0.194 \mu\text{m}$ d'épaisseur est déposé par LPCVD à 775°C , et 300 mTorr, puis gravé anisotropiquement par plasma de manière à obtenir des bandes de nitrure de largeurs différentes, le long de la direction $\langle 110 \rangle$. Celles qui ont été choisies ont une largeur de $0.87 \mu\text{m}$ (mesurée par TEM), et sont espacées de $3.5 \mu\text{m}$. Cet espacement est suffisamment grand pour éviter que les

contraintes générées par les bandes interfèrent les unes avec les autres.

Les mesures ont été faites en six points. Chaque position du faisceau a formé une image de diffraction à partir de laquelle ont été calculées les déformations ϵ_{XX} , ϵ_{ZZ} et ϵ_{XZ} . Les contraintes correspondantes, dans le système de l'échantillon, sont calculées en appliquant les équations (IV.25). Le tableau IV.5 présente les résultats obtenus par ces mesures.

Ces résultats expérimentaux ont été confrontés avec des simulations faites avec IMPACT-4 [3] et SUPREM-IV [32].

b) Simulations avec IMPACT-4 et SUPREM-IV

Le calcul des contraintes avec IMPACT-4 [3] et SUPREM-IV [32] s'appuie sur la théorie décrite dans la section IV.1. Il est possible d'activer (ou non), dans chacun de ces simulateurs, le calcul des contraintes thermiques ou de dépôt (contraintes intrinsèques) au cours de chaque étape du procédé de fabrication des structures d'isolement. Ce calcul nécessite la connaissance des coefficients d'expansion thermique de chaque matériau, de leur contrainte intrinsèque ainsi que de la matrice de rigidité du film, fonction du module d'Young et du coefficient de Poisson.

Le tableau IV.6 reporte les modules d'Young, les coefficients de Poisson et les coefficients d'expansion thermique de Si , SiO_2 et Si_3N_4 implantés par défaut dans IMPACT-4 et SUPREM-IV. En comparant les valeurs de ces paramètres pour les deux simulateurs, on observe que: i) les coefficients de Poisson sont pratiquement identiques, ii) le module d'Young de Si_3N_4 est très différent, iii) le coefficient d'expansion thermique de Si_3N_4 est très différents (par exemple, pour une température de dépôt de $775^\circ C$: $\alpha_{Si_3N_4} = 0.5 \cdot 10^{-6}/C^\circ$ dans IMPACT-4 et $\alpha_{Si_3N_4} = 3.0 \cdot 10^{-6}/C^\circ$ dans SUPREM-IV).

D'après la littérature, le coefficient d'expansion thermique du Si_3N_4 est de $(3.0 \pm 0.4) \cdot 10^{-6}/C^\circ$ [10, 11], tandis son module d'Young est compris entre $10^{12} dynes/cm^2$ et $4 \cdot 10^{12} dynes/cm^2$ [35, 59]. C'est pourquoi il nous a semblé plus exact d'utiliser les valeurs des coefficients d'expansion thermique implantés par défaut dans SUPREM-IV, et les valeurs des modules d'Young et des coefficients de Poisson implantés par défaut dans IMPACT-4.

Les valeurs des contraintes intrinsèques de SiO_2 et Si_3N_4 qui ont été utilisées sont celles qui ont été mesurées chez STMicroelectronics et qui sont présentées dans la section IV.2.2 b) ii).

Sur la Figure IV.19 sont superposées aux points expérimentaux (avec leurs barres d'erreurs) les courbes obtenues par simulation avec IMPACT-

Matériau	Module d'Young E ($dynes/cm^2$)	Coefficient de Poisson ν	Coefficient d'expansion thermique ($/^\circ C$)
Coefficients dans IMPACT-4			
Silicium	$1.87 \cdot 10^{12}$	0.28	$4.5 \cdot 10^{-6}$
Oxyde (thermique)	$0.66 \cdot 10^{12}$	0.17	$0.5 \cdot 10^{-6}$
Nitrure (LPCVD)	$3.89 \cdot 10^{12}$	0.3	$0.5 \cdot 10^{-6}$
Coefficients dans SUPREM-IV			
Silicium	$1.7 \cdot 10^{12}$	0.28	$3.052 \cdot 10^{-6}$ $+2 * 6.206 \cdot 10^{-10} * (T - 293)$
Oxyde (thermique)	$0.83 \cdot 10^{12}$	0.2	$1.206 \cdot 10^{-7}$ $+2 * 2.543 \cdot 10^{-10} * (T - 293)$
Nitrure (LPCVD)	$1 \cdot 10^{14}$	0.3	$3.0 \cdot 10^{-6}$

Tableau IV.6 – Paramètres rhéologiques implantés par défaut dans le programme de simulation IMPACT-4

4 et SUPREM-IV en utilisant les paramètres par défaut (respectivement: courbes en trait continu et en tirets). La confrontation avec les mesures n'est pas très satisfaisante. Ceci peut être dû à l'utilisation dans les simulations de paramètres non calibrés.

Nous avons vu plus haut que d'après la littérature, le module de Young du Si_3N_4 n'est pas connu avec précision [35, 59]. Un autre paramètre n'est pas non plus connu avec exactitude: la contrainte intrinsèque du nitrure $\sigma_{int}(Si_3N_4)$ qui peut varier entre $1.2 \cdot 10^{10} dynes/cm^2$ et $1.6 \cdot 10^{10} dynes/cm^2$ [27, 18, 60, 61]. Nous avons donc décidé de réaliser une calibration de ces deux paramètres à partir d'un plan d'expérience avec Ulysses (voir paragraphe II.2 du Chapitre II), afin de trouver le couple qui donnerait des contraintes calculées par simulation plus proches de celles mesurées.

c) Calibration de $E_{Si_3N_4}$ et $\sigma_{int}(Si_3N_4)$, par plan d'expérience

Après quelques études préliminaires, les intervalles utilisés pour les facteurs sont les suivants:

$$E_{Si_3N_4} = [1.0 \cdot 10^{12} - 5.4 \cdot 10^{12}] dynes/cm^2 \quad (IV.26)$$

$$\sigma_{int}(Si_3N_4) = [0.8 \cdot 10^{10} - 2 \cdot 10^{10}] dynes/cm^2 \quad (IV.27)$$

Puis un plan d'expérience LATIN (paragraphe II.2.3 a) du Chapitre II), comprenant 28 expériences a été choisi. Les réponses sont les contraintes σ_{xx} , σ_{zz} et σ_{xz} mesurées. La régression (paragraphe II.2.3 c) du Chapitre II) a permis d'exprimer σ_{xx} , σ_{zz} et σ_{xz} en fonction de $E_{Si_3N_4}$ et $\sigma_{int}(Si_3N_4)$. Les trois coefficients de régression (R^2 , R_a^2 , R_{pr}^2) étant supérieurs à 0.95, le macromodèle obtenu est déclaré prédictif. L'optimisation a été faite à l'aide des méthode Monte-Carlo et Quadprog (paragraphe II.2.3 g) du Chapitre II) avec Ulysses. Le couple optimal obtenu est le suivant:

$$E_{Si_3N_4} = 3 \cdot 10^{12} \text{ dynes/cm}^2 \quad (\text{IV.28})$$

$$\sigma_{int}(Si_3N_4) = 1.5 \cdot 10^{10} \text{ dynes/cm}^2 \quad (\text{IV.29})$$

d) Confrontation des mesures et des simulations

Une coupe 1D de la structure simulée a été effectuée le long de l'abscisse x et à chaque profondeur y à laquelle la mesure a été effectuée. Les contraintes σ_{xx} , σ_{yy} et σ_{xy} calculées numériquement par IMPACT-4 permettent de déduire les déformations grâce aux équations (IV.25).

La Figure IV.19 permet de comparer les résultats expérimentaux (avec leurs barres d'erreurs) aux simulations faites avec: i) les paramètres par défaut (courbes en trait continu obtenues avec SUPREM-IV et courbes en tirets obtenues avec IMPACT-4), et ii) les paramètres optimisés (courbes en pointillé) pour les contraintes et les déformations. Nous observons que les confrontations simulations-mesures sont effectivement meilleures avec les paramètres optimisés.

Les Figures IV.20 à IV.22 comparent les résultats expérimentaux (avec leurs barres d'erreurs) aux simulations faites avec: i) SUPREM-IV (courbes en trait continu) et ii) IMPACT-4 (courbes en pointillé) pour les contraintes et les déformations. Les paramètres utilisés sont ceux optimisés. Les erreurs sur les mesures des déformations sont de l'ordre de $\pm 4 \cdot 10^{-4}$ pour ϵ_{XX} , $\pm 2 \cdot 10^{-4}$ pour ϵ_{ZZ} , et $\pm 1 \cdot 10^{-4}$ pour ϵ_{XZ} . Etant donné l'axe de zone utilisé pour réaliser les mesures ($< 130 >$), les lignes des HOLZ dues aux déformations le long de Z se déplacent plus que celles dues aux déformations le long de X. Si bien que la mesure est plus sensible le long de Z que le long de X: l'erreur sur ϵ_{XX} est plus grande que sur ϵ_{ZZ} .

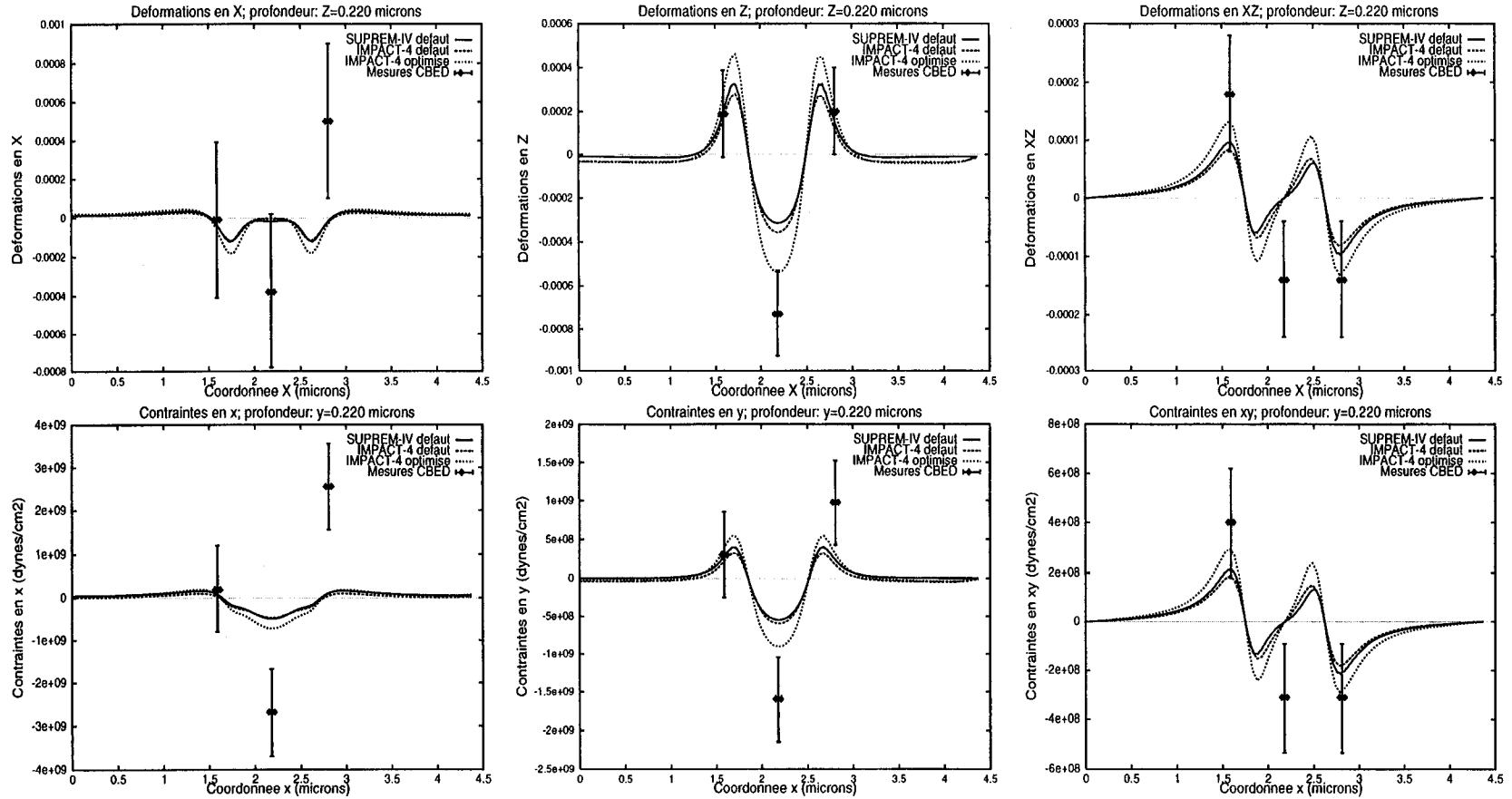


Figure IV.19 – Comparaison entre les résultats expérimentaux (avec leurs barres d'erreurs) et les simulations obtenues avec: i) les valeurs de $E_{Si_3N_4}$ et $\sigma_{int}(Si_3N_4)$ prises par défaut, pour SUPREM-IV (courbes en trait continu) et IMPACT-4 (courbes en tirets), ii) les valeurs de $E_{Si_3N_4}$ et $\sigma_{int}(Si_3N_4)$ optimisées, pour IMPACT-4 (courbes en pointillé). Les déformations en XX , ZZ et XZ et les contraintes en xx , yy et xy sont représentées pour une profondeur de $0.220\mu m$. Les relations entre les déformations et les contraintes sont exprimées par les relations (IV.25).

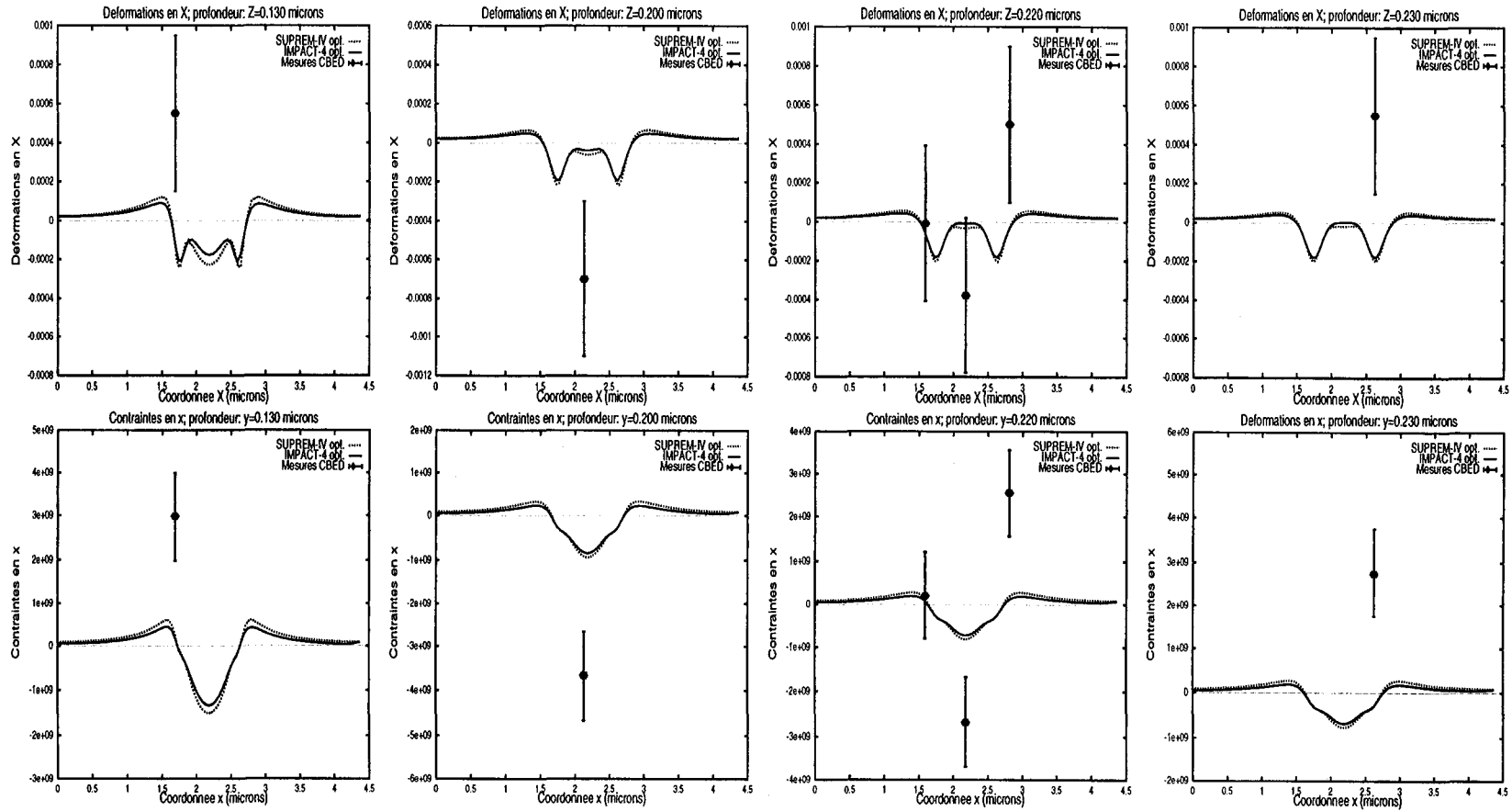


Figure IV.20 – Comparaison entre les simulations obtenues avec SUPREM-IV (courbes en pointillé) et IMPACT-4 (courbe en trait continu) et les points expérimentaux (avec leurs barres d'erreurs). Les graphes représentent les déformations normales en XX et les contraintes normales en xx , à quatre profondeurs différentes: $y = 0.130\mu\text{m}$; $0.200\mu\text{m}$; $0.220\mu\text{m}$; $0.230\mu\text{m}$. Les relations entre les déformations et les contraintes sont exprimées par les relations (IV.25).

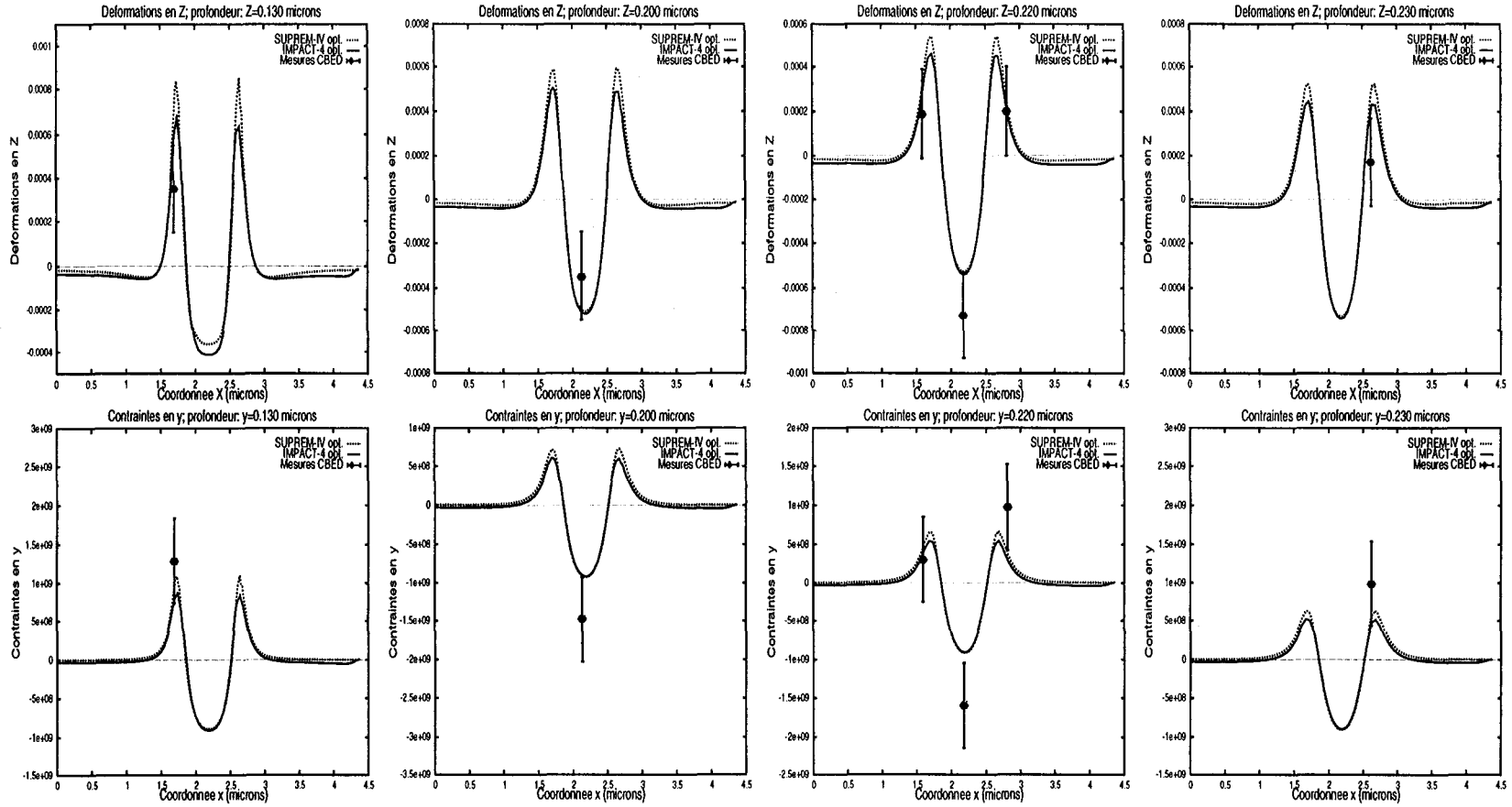


Figure IV.21 – Comparaison entre les simulations obtenues avec SUPREM-IV (courbes en pointillé) et IMPACT-4 (courbe en trait continu) et les points expérimentaux (avec leurs barres d'erreurs). Les graphes représentent les déformations normales en ZZ et les contraintes normales en yy, à quatre profondeurs différentes: $y = 0.130\mu\text{m}$; $0.200\mu\text{m}$; $0.220\mu\text{m}$; $0.230\mu\text{m}$. Les relations entre les déformations et les contraintes sont exprimées par les relations (IV.25).

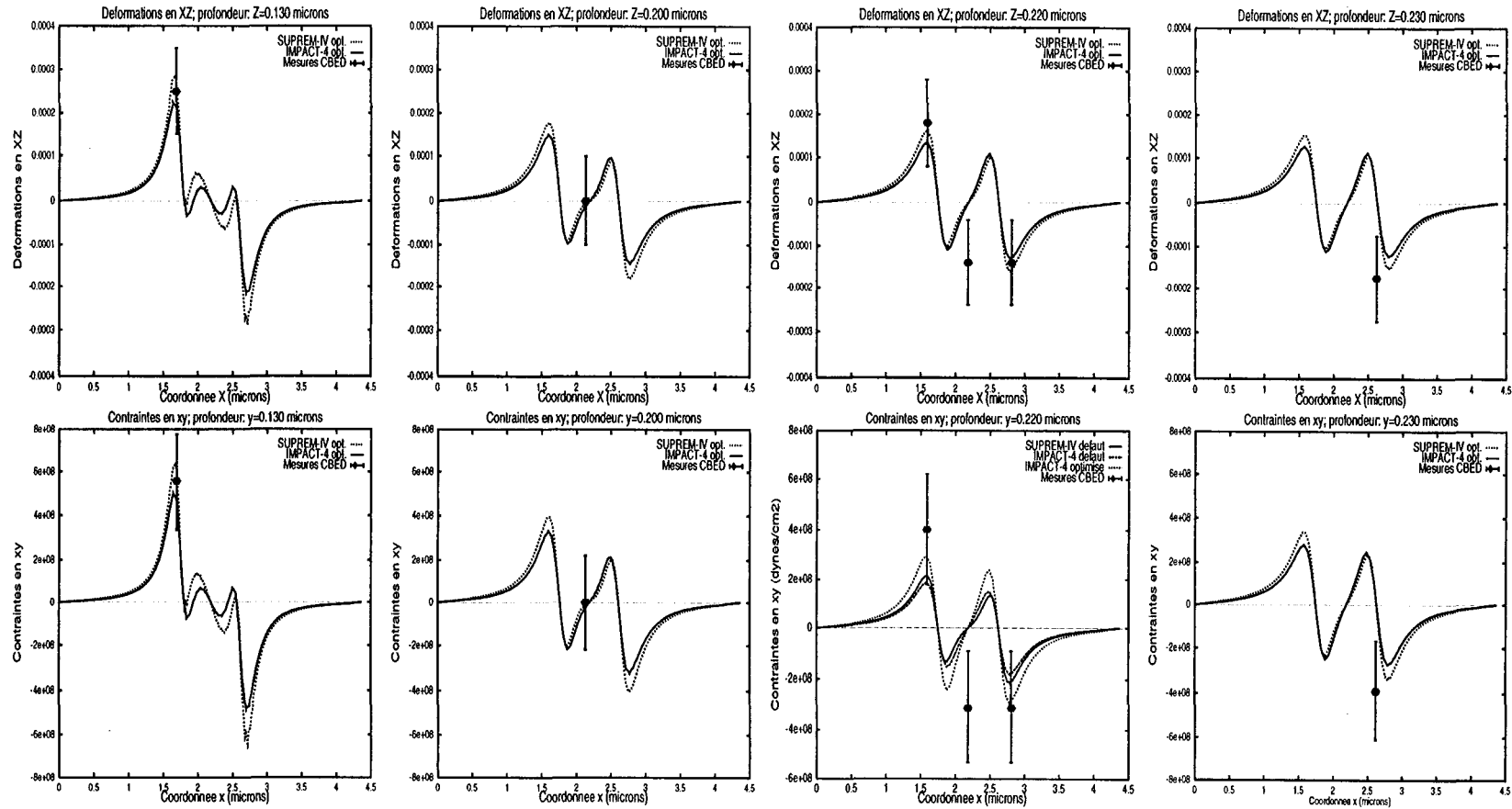


Figure IV.22 – Comparaison entre les simulations obtenues avec SUPREM-IV (courbes en pointillé) et IMPACT-4 (courbe en trait continu) et les points expérimentaux (avec leurs barres d'erreurs). Les graphes représentent les déformations de cisaillement en XZ et les contraintes de cisaillement en xy, à quatre profondeurs différentes: $y = 0.130\mu\text{m}$; $0.200\mu\text{m}$; $0.220\mu\text{m}$; $0.230\mu\text{m}$. Les relations entre les déformations et les contraintes sont exprimées par les relations (IV.25).

Les courbes obtenues avec les deux simulateurs sont pratiquement identiques, et reproduisent assez bien le niveau des contraintes et des déformations mesurées sauf pour ϵ_{XX} et σ_{xx} . Pour celles-ci, nous pouvons cependant remarquer que les résultats expérimentaux sont de l'ordre de grandeur de l'erreur sur la mesure ($\pm 4 \cdot 10^{-4}$ pour les déformations en X). Ceci pourrait donc expliquer le fait qu'il n'existe pas un très bon accord entre les résultats expérimentaux et les simulations, pour ϵ_{XX} et σ_{xx} , contrairement à ϵ_{ZZ} , ϵ_{XZ} et σ_{yy} , σ_{xy} . Ces résultats montrent cependant que les programmes de simulations IMPACT-4 et SUPREM-IV prédisent correctement le niveau de contraintes issues des étapes thermiques et de dépôt du procédé de fabrication.

Nous allons maintenant étudier les contraintes dans le cas d'une structure oxydée.

IV.4.2 Etude des contraintes générées dans une structure oxydée

a) Description de la structure étudiée

Une structure de type LOCOS enterré a été fabriquée. Ses caractéristiques géométriques sont décrites dans le tableau IV.7. Elle possède les mêmes caractéristiques que la structure non oxydée, mesurée précédemment.

épaisseur du nitrure (μm)	épaisseur du piédestal (μm)	largeur du nitrure (μm)	gravure (μm)	pitch (μm)	Temp. ($^{\circ}C$)	temps oxyd. (min)
0.200	0.020	0.87	0.050	1.74	1000	145

Tableau IV.7 – Description de la structure d'isolement oxydée qui a été mesurée par CBED.

La Figure IV.23 montre le résultat de la simulation de cette structure pour IMPACT-4. Les contraintes normales en xx sont reportées sur la figure.

b) Confrontation entre simulations et mesures des contraintes

Les simulations ont été effectuées avec IMPACT-4, en utilisant les valeurs des paramètres calibrés dans le Chapitre II. Sur les Figures IV.24 à IV.26 les courbes des déformations et des contraintes simulées avec IMPACT-4 sont confrontées aux mesures. Les résultats sont donnés pour deux profondeurs y. On remarque que le niveau des contraintes de cette structure oxydée est environ d'un ordre de grandeur plus élevé que celui de la structure non oxydée de la section IV.4.1 d).

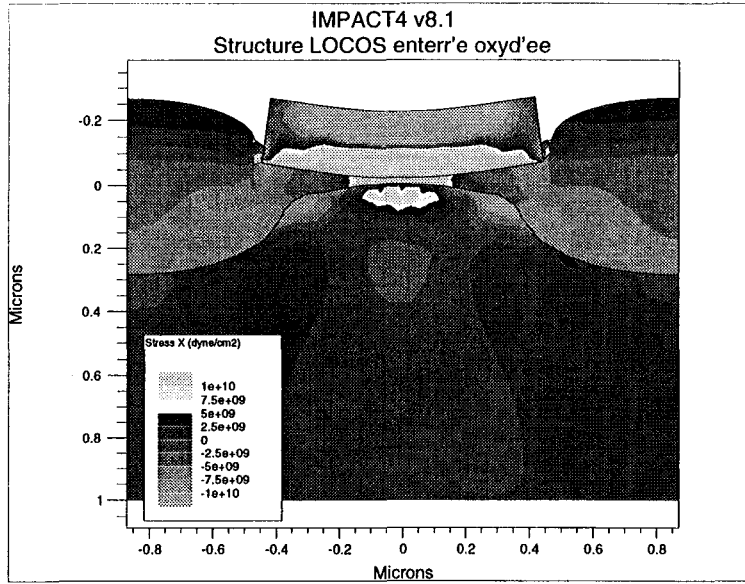


Figure IV.23 – Topologie de la structure du tableau IV.7, simulée par IMPACT-4. La cartographie des contraintes suivant la direction x est également donnée.

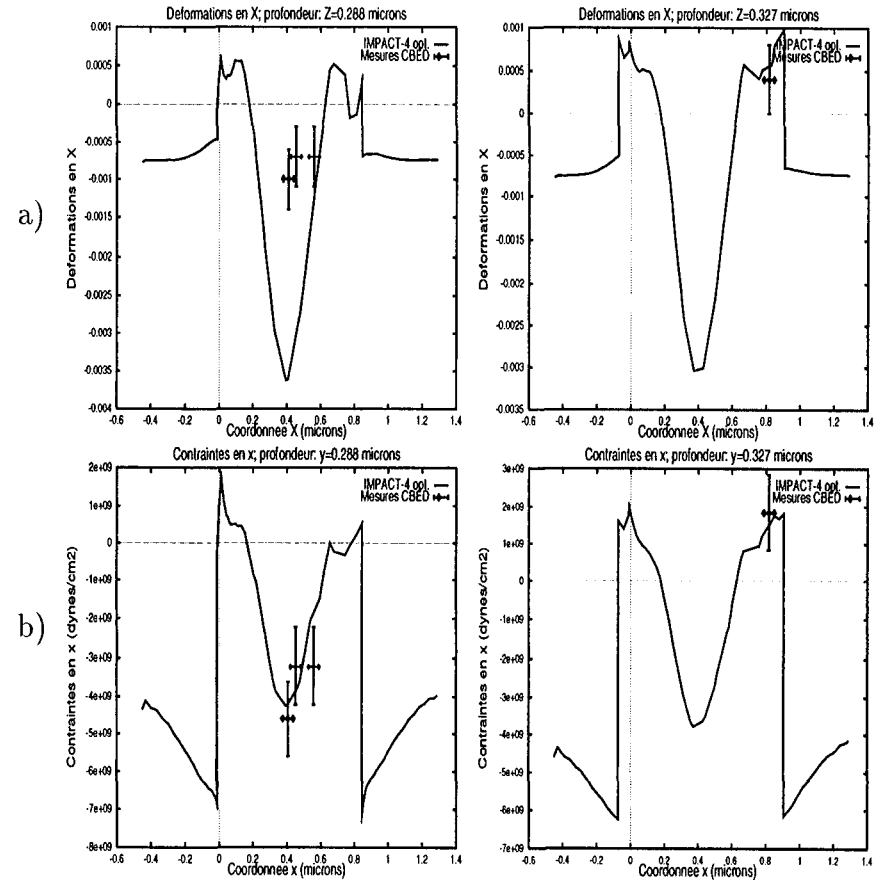


Figure IV.24 – Confrontation entre les simulations obtenues avec IMPACT-4 (courbe en trait continu) et les points expérimentaux (avec les barres d'erreurs), pour la structure décrite dans le tableau IV.7, ayant un pitch de $1.75\mu\text{m}$ de large: a) déformations planes en XX ; b) contraintes planes en xx . Les mesures ont été faites à deux profondeurs: $0.288\mu\text{m}$, $0.327\mu\text{m}$.

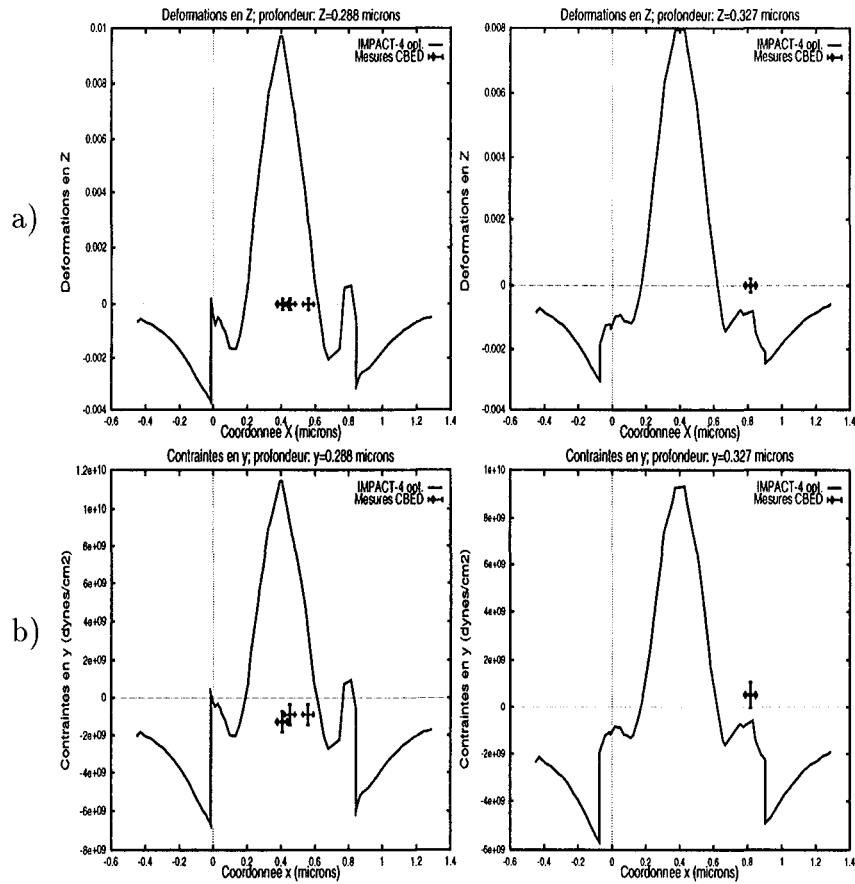


Figure IV.25 – Confrontation entre les simulations obtenues avec IMPACT-4 (courbe en trait continu) et les points expérimentaux (avec les barres d'erreurs), pour la structure décrite dans le tableau IV.7, ayant un pitch de $1.75\mu\text{m}$ de large: a) déformations planes en ZZ; b) contraintes planes en yy. Les mesures ont été faites à deux profondeurs: $0.288\mu\text{m}$, $0.327\mu\text{m}$.

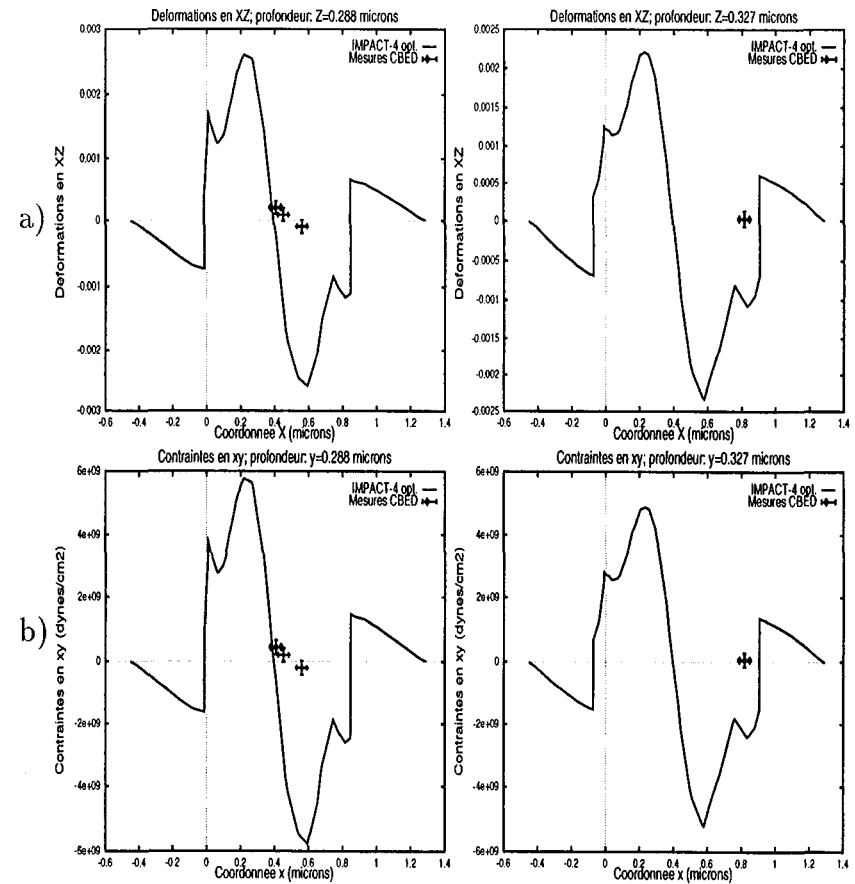


Figure IV.26 – Confrontation entre les simulations obtenues avec IMPACT-4 (courbe en trait continu) et les points expérimentaux (avec les barres d'erreurs), pour la structure décrite dans le tableau IV.7, ayant un pitch de $1.75\mu\text{m}$ de large: a) déformations de cisaillement en XZ; b) contraintes de cisaillement en xy. Les mesures ont été faites à deux profondeurs: $0.288\mu\text{m}$, $0.327\mu\text{m}$.

Il existe un assez bon accord entre les mesures et les simulations. Nous remarquons, comme précédemment un moins bon accord pour les déformations en XX et les contraintes en xx .

IV.5 Conclusions

La réduction des dimensions des dispositifs provoque l'augmentation du niveau des contraintes. Ces contraintes, générées au cours des différentes étapes de fabrication, ont différentes origines: i) les contraintes d'origine thermique, ii) les contraintes intrinsèques, iii) les contraintes issues de la croissance d'un matériau. Les modèles permettant de calculer ces contraintes sont implantées dans IMPACT-4. Il était nécessaire de vérifier la validité de ces modèles, et l'exactitude de leur calibration. C'est pourquoi nous avons investigué des techniques de mesures des contraintes mécaniques.

L'effet des contraintes sur les phénomènes physiques a été mis en évidence de nombreuses fois. Ainsi, Osada [5] a montré l'influence des contraintes sur la diffusion de Bore dans le substrat de silicium. De même, Smeys [6] a montré cette influence sur le courant de fuite de la jonction (qui augmente avec les contraintes). Ces effets permettent de mesurer "indirectement" l'exactitude de l'intensité des contraintes que l'on calcule.

Cependant, des méthodes permettent de mesurer directement ce niveau. Dans ce chapitre, nous avons présenté trois de ces méthodes. La première est la méthode de déflexion. Elle permet de calculer les contraintes résiduelles et intrinsèques présentes dans les films déposés ou ayant grandi sur un substrat de silicium (pleine plaque), en mesurant la courbure de la plaque.

La seconde est la spectroscopie micro-Raman. A partir du déplacement du pic des spectres Raman, dû à la présence de déformations dans le substrat, l'amplitude des contraintes peut être déduit. Cependant, les différentes composantes du tenseur ne peuvent pas, sauf cas particulier, être déterminées. De plus la résolution spatiale de cette technique est trop faible. Néanmoins, dans un cas particulier [39], nous avons pu confronter avec succès des mesures de contraintes par micro-Raman avec des résultats obtenus par simulations avec IMPACT-4.

Une troisième méthode, possédant une meilleure résolution, a été développée. Il s'agit de la Diffraction Electronique par Faisceau Convergent (CBED). Cette technique est utilisée au laboratoire LAMEL de Bologne, Italie. Elle utilise un microscope électronique à transmission (TEM). Elle s'appuie sur

l'influence des déformations sur la diffraction électronique dans un matériau cristallin comme le silicium. En effet, la position de certaines lignes (lignes des HOLZ), observées sur les figures de diffraction est sensible à ces déformations. La mesure de ce déplacement permet d'obtenir les déformations, puis de calculer les contraintes correspondantes. Des déformations de $2 \cdot 10^{-4}$ peuvent être mesurées et la résolution du faisceau est de $200 - 300 \text{ \AA}$. Cette technique est largement décrite dans la section IV.3.

Une fois définies les relations entre les déformations, mesurées dans le système de référence du CBED (XYZ), et les contraintes, calculées dans le système de référence de la fabrication (xyz), nous pouvons confronter les résultats mesures-simulations. Le laboratoire LAMEL a mesuré les déformations dans le substrat de deux structures: un LOCOS non oxydé, et un LOCOS enterré oxydé de caractéristiques géométriques identiques à celles de la structure non oxydée. A nouveau, nous avons comparé les résultats expérimentaux aux simulations. Une calibration du module d'Young et de la contrainte intrinsèque du nitrure a été nécessaire pour mieux reproduire les résultats expérimentaux. Les paramètres calibrés sont les suivants: $E_{Si_3N_4} = 3 \cdot 10^{12} \text{ dynes/cm}^2$, $\sigma_{int}(Si_3N_4) = 1.5 \cdot 10^{10} \text{ dynes/cm}^2$.

Un assez bon accord entre les mesures et les simulations est obtenu pour les déformations et les contraintes.

Ces relativement bons résultats permettent de valider non seulement les modèles implantés dans IMPACT-4 mais aussi les valeurs des paramètres calibrés au Chapitre II. Nous avons donc à disposition un programme de simulation susceptible de prédire non seulement la topologie mais également le niveau des contraintes mécaniques générées lors de la fabrication d'une structure d'isolement.

Bibliographie

- [1] L. Doucet, "Caractérisation mécanique et physico-chimique des matériaux métalliques et diélectriques dans des structures d'interconnexions destinées à la micro-électronique", *Thèse présentée à l'Institut National Polytechnique de Grenoble*, (Sept. 1996).
- [2] I. de Wolf, J. Vanhellemont, A. Romano-Rodriguez, H. Norström, H. E. Maes, "Micro-Raman study of stress distribution in local isolation structures and correlation with TEM", *J. App. Phys.*, **71**, (Jan. 1992), p. 898.
- [3] A. Romano-Rodriguez, J. Vanhellemont, I. de Wolf, H. Norström, H. E. Maes, *Inst. Phys. Conf. Ser.*, **117**, (1991), p. 165.
- [4] B. Baccus, D. Collard, P. Ferreira, V. Senez, E. Vandebossche, "IMPACT-4: Isen Modeling Package For Integrated Circuit Technology, Version 4.8.1", (11/1996).
- [5] K. Osada, Y. Zaitzu, S. Matsumoto, M. Yoshida, E. Arai, T. Abe, "Effects of stress in the deposited silicon nitride films on boron diffusion of silicon", *J. Electrochem. Soc.*, **142**, no. 1, (Jan. 1995), p. 202.
- [6] P. Smeys, P.B Griffin, Z. U. Rek, I. De Wolf, K.C. Saraswat, "The Influence of Oxidation-induced Stress on the Generation Current and its Impact on Scaled Device Performance", *Proceeding IEEE'96*, (1996), p. 709.
- [7] B. Leroy, C. Plougonven, "Warpage of Silicon Wafers", *J. Electrochem. Soc.*, **127**, no. 4, (Apr. 1980), p. 961.
- [8] K. Kobayashi, Y. Inoue, T. Nishimura, M. Hirayama, Y. Akasaka, T. Kato, S. Ibuki, *J. Electrochem. Soc.*, **137**, (1990), p. 1987.
- [9] R. Balboni, S. Frabboni, "CBED strain measurements in Boron implanted Silicon", *Microsc. Microanal. Microstruct.*, **2**, (Dec. 1991), p. 617.

- [10] M. Stadtmüller, "Mechanical Stress of CVD-Dielectrics", *J. Electrochem. Soc.*, **139**, no. 12, (1992), p. 3669.
- [11] P. Ambrée, F. Kreller, R. Wolf, K. Wandel, "Determination of the Mechanical Stress in Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposited SiO_2 and SiN Layers", *J. Vac. Sci. Technol.*, **B 11**, no. 3, (1993), p. 614.
- [12] G.G. Stoney *Proc. Roy. Soc.*, **A82**, (1909), p. 172.
- [13] P.A. Flinn, D.S. Gardner, W.D. Nix, *IEEE Trans. Electron. Dev.*, **ED34(3)**, (1987), p. 689.
- [14] E. Klockholm, B.S. Berry, *J. Electrochem. Soc.*, **115**, (1968), p. 823.
- [15] J.A. Aboaf, "Some properties of vapor deposited silicon nitride films obtained by the reaction of $SiBr_4$ and NH_3 ", *J. Electrochem. Soc.*, **116**, (Dec. 1969), p. 1732.
- [16] R.J. Jaccodine, W.A. Schlegel, *J. Appl. Phys.*, **37**, (1966), p. 2429.
- [17] M. Tamura, H. Sunami, "Generation of dislocations induced by chemical vapor deposited Si_3N_4 films on silicon", *Jap. J. Appl. Phys.*, **8**, Aug. 1972, p. 1097.
- [18] S.M. Hu, "Stress Related Problems in Silicon Technology", *J. Appl. Phys.*, **70**, no. 6, (1991), p. R68.
- [19] T. Serikawa, A. Okamoto, *J. Electrochem. Soc.*, **131**, (1984), p. 292.
- [20] E.P. Eernisse, "Stress in Thermal SiO_2 during Growth", *Appl. Phys. Lett.*, **35**, no. 1, (Jul. 1979), p. 8.
- [21] E. Kobeda, E.A. Irene, *J. Vac. Sci. Tech. B*, **5**, (1987), p. 15.
- [22] E. Kobeda, E.A. Irene, *J. Vac. Sci. Tech. B*, **6**, (1988), p. 574.
- [23] N.F. Mott, *Proc. R. Soc. London*, **376**, (1981), p. 207.
- [24] S.M. Hu, *J. Appl. Phys.*, **45**, (1974), p. 1567.
- [25] P. Ferreira, V. Senez, B. Baccus, "Mechanical stress analysis of a LDD-MOSFET structure", *Proceedings of ESSDERC'95*, (Sep. 1995), p. 183.
- [26] P. Ferreira, *Thèse de Doctorat en préparation à l'Université des Sciences et Technologies de Lille*, (1997).
- [27] P. Colpani, "Mesures de contraintes résiduelles dans des films de nitrure et oxyde de silicium" *STMicronics internal publication* (1996).

- [28] S. Mizuo, H. Higuchi, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **21**, (1982), p. 281.
- [29] S.T. Ahn, H. W. Kennel, J.D. Plummer, W.A. Tiller, *J. Appl. Phys.*, **64**, (1988), p. 4914.
- [30] W. Paul, D.M. Warschauer, "Solid under Pressure", *IEEE Trans. Elec. Dev.*, **35**, no. 1, (1988) p. 25.
- [31] V. Senez, "First release of Software with Pressure Model", *JESSI BT111/ESPRIT 21752 ADEQUAT+*, **Deliverable D2318**, (Apr. 1997).
- [32] SILVACO International, "Athena, User's Guide, Version 4.0.0", *Université de Stanford, Etats-Unis*, (10/1996).
- [33] J. Vanhellemont et al., *MRS'95 Symposium 406*, (1995), p. 479.
- [34] J. Lorenz, C. Hill, H. Jaouen, C. Lombardi, C. Lyden, K. de Meyer, J. Pelka, A. Poncet, M. Rudan, S. Solmi, "The STORM Technology CAD System", *SISDEP'93*, (1993), p. 163.
- [35] S. Hong, T.P. Weihs, J.C. Bravman, W.D. Nix, "Measuring stiffnesses and residual stresses of silicon nitride thin films", *J. Electron. Mat.*, **19**, no. 9, (1990), p. 903.
- [36] G.H. Loechelt, N.G. Cave, J. Menendez, "Measuring the tensor nature of stress in silicon using polarized off-axis Raman spectroscopy", *Appl. Phys. Lett.*, **66**, no.26, (1995), p. 3639.
- [37] H. Miura, H. Ohta, H. Sakata, N. Okamoto, "Residual stress measurement in silicon substrates after thermal oxidation", *JSME International Journal*, **36**, no. 3, (Mar. 1993), p. 302.
- [38] K. Brunner, G. Abstreiter, B.O. Kolbesen, H.W. Meul, *Proceedings INFOS'89*, (1989), p. 116.
- [39] I. De Wolf, H. Nortröm, H.E. Maes, "Process-induced mechanical stress in isolation structures studied by micro-Raman spectroscopy", *J. Appl. Phys.*, **74**, no. 7, (1993), p. 4491.
- [40] S.K. Jones, M. Ahmed, W.J. Rothwell, I. de Wolf, L. Deferm, "Characterization of mechanical stress in advanced PBL isolation", *Proceedings ESSDERC'93*, (1993), p. 255.
- [41] I. De Wolf, D.J. Howard, K. Maex, H. Maes, "Mechanical stress in and surrounding CoSi₂ and TiSi₂ lines", *Proceedings ESSDERC'96*, (1996), p. 609.

- [42] E. Anatassakis, E. Burstein, *J. Phys. Chem. Solids*, **32**, (1971), p. 563.
- [43] J. Vanhellefont, S. Amelinckx, "Film-edge-induced dislocation generation in silicon substrates. I. Theoretical model." *J. Appl. Phys.*, **61**, no. 6, (Mar. 1987), p. 2170.
- [44] S.M. Hu, "Film-edge-induced stress in substrates", *J. Appl. Phys.*, **50**, no. 7, (Jul. 1979), p. 4661.
- [45] D.B. Williams, C.B. Carter, "Transmission Electron Microscopy", *Plenum Press New York and London*, vol. IV, chap. 20, (1996), p. 303.
- [46] W. Kossel, G. Möllenstedt, *Ann. der Phys.*, **36**, (1939), p. 113.
- [47] P.M. Jones, G.M. Rackham, J.W. Steeds, *Proc. Roy. Soc.*, **A 354**, (1977), p. 197.
- [48] A. Armigliato, R. Balboni, F. Corticelli, S. Frabboni, F. Malvezzi, J. Vanhellefont, "Analytical electron microscopy of Si(1-x)Ge(x)/Si heterostructures and local isolation structures", *Mat. Sci. Tech.*, **11**, (1995), p. 400.
- [49] A. Garulli, A. Armigliato, M. Vanzi, *J. Microsc. Spectrosc. Electron.*, **10**, (1985), p. 135.
- [50] "Manuel du TEM CM30", *Philips Electron Optics*, (1988), p. 13.
- [51] C.J. Humphreys, D.J. Eaglesham, D.M. Maher, H.L. Fraser, *Ultramicroscopy*, **26**, (1988), p. 13.
- [52] D. Cherns, A.R. Preston, *J. Electron. Microsc. Tech.*, **13**, (1989), p. 111.
- [53] A. Armigliato, M. Servidori, F. Cembali, R. Fabbri, R. Rosa, F. Corticelli, D. Govoni, A.V. Drigo, M. Mazzer, F. Romanato, S. Frabboni, R. Balboni, S.S. Iyer, A. Guerrieri, "Structural and analytical characterization of Si(1-x)Ge(x)/Si heterostructures by Rutherford backscattering spectrometry and channeling, analytical electron microscopy and double crystal X-ray diffractometry", *Microsc. Microanal. Microstruct.*, **3**, (Aug. 1992), p. 363.
- [54] P. Stadelmann, *Ultramicroscopy*, **21**, (1987), p. 131.
- [55] A. Armigliato, R. Balboni, I. De Wolf, S. Frabboni, K.G.F. Janssens, J. Vanhellefont, "Determination of lattice strain in local isolation structures by electron diffraction techniques and micro-Raman spectroscopy", *Microsc. Semicond. Mater. Conf., Oxford*, no. 134, section 5, (Apr. 1993), p. 229.

- [56] G. Vanhellemeont, A. Armigliato, R. Balboni, S. Frabboni, Kgf. Janssens, "On the TEM Assesment on the strain distributions in integrated circuits structures", *Proc. ICEM no 13*, **2A**, (1994), p. 651.
- [57] R. Balboni, S. Frabboni, A. Armigliato, "Determination of bulk mismatch vales in transmission electron microscopy cross-sections of heterostructures by convergent-beam electron diffraction", *Phil. Mag. A*, **77**, (1998), p. 67.
- [58] A. Armigliato, R. Balboni, S. Frabboni, A. Tixier, G.P. Carnevale, P. Colpani, A. Marmiroli, "Strain in silicon below Si_3N_4 stripes. Comparison between SUPREM-IV calculation and TEM/CBED measurements", *GADEST'97*, (1997).
- [59] T.F. Retajezyk, A.K. Sinha, *Thin Solid Films*, **70**, (1980), p. 241.
- [60] P. Smeys, P.B. Griffin, Z.U. Rek, I. de Wolf, K.C. Saraswat, "The influence of oxidation-induced stress on generation current and its impact on scaled device performance", *Proceeding of IEDM'96*, (1996), p. 709.
- [61] D.J. Bazley, S.K. Jones, "Calibration of 2D stress Models", *unpublished work*.

Chapitre V

Conclusions et Perspectives

L'intégration de dispositifs de plus en plus petits dans les circuits intégrés est l'un des objectifs principaux des entreprises du secteur de la microélectronique parmi lesquelles on compte STMicroelectronics. Une large partie de la recherche et du développement de ces sociétés est d'ailleurs consacrée à cet objectif. Pour cela il faut optimiser chaque étape du procédé et mettre au point de nouvelles technologies lorsque l'on atteint les limites des précédentes. Les progrès extraordinaires que connaît actuellement le domaine de la microélectronique sont rendus entre autres possibles grâce à l'utilisation croissante de programmes de simulation. Ceux-ci aident tout d'abord au développement des dispositifs, en offrant en peu de temps des résultats peu onéreux, et ensuite ils permettent de comprendre en détail les phénomènes qui sont mis en jeu au cours des étapes de fabrication.

Une des étapes à optimiser est l'isolement. Son but est de réaliser des structures d'oxyde de silicium afin d'isoler latéralement les dispositifs les uns des autres. Actuellement, ces structures d'isolement occupent, en fin de fabrication, plus de 50% de la surface du circuit intégré. Aussi, un effort important est consacré à leur miniaturisation. Ces structures sont obtenues de deux façons: i) par remplissage par dépôt d'oxyde de silicium d'une cavité gravée dans le substrat [1]; ii) par oxydation thermique et sélective du substrat [2]. C'est cette dernière solution qui est couramment utilisée chez STMicroelectronics à Agrate pour les technologies CMOS jusqu'au $0.35 \mu m$. Ces structures, dites "LOCOS", doivent satisfaire le cahier des charges suivant pour assurer un bon isolement: i) oxyde de champ suffisamment épais et enterré; ii) perçage du piédestal d'oxyde minimisé; iii) bec d'oiseau réduit; iv) contraintes générées au cours de l'oxydation thermique minimales. Or, la réduction des dimensions tend à provoquer les effets inverses. Nous nous sommes donc aidés du programme de simulation bi-dimensionnel IMPACT-4 [3], permettant notamment de reproduire les phénomènes relatifs à l'étape

d'isolement, pour optimiser des structures dédiées à la génération CMOS 0.35 μm .

Cependant, l'utilisation de manière prédictive de programmes de simulation nécessite d'une part l'implantation de modèles physiques reproduisant avec précision les phénomènes étudiés, et d'autre part l'ajustement de certains paramètres utilisés dans ces modèles. En effet, certains paramètres sont calibrés pour des caractéristiques technologiques bien précises. Mais ils ne permettent pas toujours de reproduire l'expérience lorsque les conditions sont modifiées. Ces calibrations ne sont pas universelles. C'est pourquoi, nous avons dans un premier temps calibré IMPACT-4 pour les conditions technologiques des structures que nous avons étudiées, avant de pouvoir l'utiliser de manière prédictive.

Dans IMPACT-4, l'oxydation du silicium est modélisée par une extension bi-dimensionnelle du modèle de Deal et Grove [4]. Dans ce modèle [5, 6], les effets des contraintes, i) issues de l'expansion en volume du Si ou du SiO_2 et ii) de la déformation des matériaux adjacents, sont pris en compte dans la cinétique d'oxydation. Ainsi la diffusivité des oxydants est réduite dans un matériau en compression, tout comme la constante de réaction lorsque la surface du silicium est soumise à une contrainte normale compressive. Les contraintes dans IMPACT-4 sont calculées à partir des déformations des matériaux, en considérant les modèles rhéologiques suivants: i) le silicium est un matériau élastique; ii) le nitrure et l'oxyde de silicium sont des matériaux adoptant une loi viscoélastique non-linéaire. Pour ces derniers leur viscosité décroît de façon exponentielle en fonction des contraintes de cisaillement.

Dans les modèles utilisés pour l'oxydation du silicium, six paramètres non mesurables par l'expérience ont été calibrés. Une méthode se fondant sur une technique de régression statistique (RSM) a été utilisée pour parvenir à cette calibration [7]. Les valeurs optimisées de ces paramètres ont été obtenues à partir des modèles empiriques reproduisant le comportement des réponses étudiées en fonction de ces paramètres.

Cette calibration nous a permis ensuite de faire l'étude de structures NCLAD [8], dans le but de déterminer si elles constituaient une alternative aux structures LOCOS enterrées jusqu'ici utilisées. L'originalité de ces structures se situe dans la forme "encapsulée" des bandes de nitrure. En effet, celles-ci présentent des "bouchons" de nitrure à leurs bords inférieurs, ayant pour effet de réduire la diffusion des agents oxydants au niveau du piédestal d'oxyde, et donc de diminuer l'épaisseur du bec d'oiseau.

Le nitrure en présence d'agents oxydants est transformé en SiO_2 . Ainsi,

au cours de l'oxydation thermique, les "bouchons" de nitrure des structures NCLAD sont consommés et leur largeur réduite. Ceci peut alors les rendre moins efficaces pour diminuer l'épaisseur du bec d'oiseau. L'étude des structures NCLAD par simulation a donc nécessité l'implantation dans IMPACT-4 d'un modèle d'oxydation du nitrure, afin de reproduire ces effets [9]. Ceci nous a permis de définir la largeur optimale des "bouchons" pour une oxydation réalisée à 1050°C. Puis, l'influence de la largeur du bouchon sur la topographie de structures NCLAD a été étudiée. Le but de cette étude était de déterminer l'amélioration que les NCLAD pouvaient apporter aux structures d'isolement de la génération CMOS 0.35 μm [10]. Il a été observé que pour les caractéristiques géométriques de ces structures, les "bouchons" réduisent peu l'épaisseur du bec d'oiseau. N'observant pas de nette amélioration, pour l'utilisation que l'on veut en faire et sachant que leur fabrication nécessite des étapes supplémentaires, les structures de type NCLAD n'ont pas été retenues pour succéder aux structures LOCOS enterrées habituellement utilisées pour les CMOS.

La calibration réalisée dans le chapitre II a aussi permis de faire une étude des contraintes générées dans le substrat, au cours de certaines étapes du procédé. Le niveau des contraintes est un critère important dans l'optimisation des structures d'isolement. En effet, un niveau trop important peut provoquer la formation de dislocations, de défauts cristallins etc... entraînant l'augmentation des risques de défaillance du dispositif électronique. Ainsi, leur simulation est une donnée précieuse pour le travail d'optimisation. Il est cependant nécessaire de vérifier que les simulations sont prédictives par confrontation avec des mesures.

Trois techniques de mesures des contraintes ont été étudiées: i) mesures par déflexion; ii) mesures par micro-Raman; iii) mesures par CBED (diffraction électronique par faisceau convergent). Cette dernière est plus précise que les deux autres, parce qu'elle permet, à partir des déformations obtenues par des figures de diffraction, de calculer les contraintes correspondantes. Le diamètre du faisceau utilisé (200 Å) est suffisamment étroit pour l'étude de nos structures, et les composantes des contraintes peuvent être obtenues indépendamment les unes des autres. Des mesures de déformations réalisées par CBED ont permis de calculer les contraintes en différents points du substrat d'une structure LOCOS non oxydée [11], et d'une structures LOCOS enterrée oxydée. La confrontation entre mesures et simulations montrent un assez bon accord.

Le travail réalisé au cours de cette thèse a une application directe sur l'étude ou l'optimisation:

- i) de la topographie des structures d'isolement de type LOCOS enterré, qui sont actuellement utilisées, à Agrate pour les CMOS 0.35 μm ;
- ii) des structures d'isolement par tranchées qui seront utilisées pour les CMOS 0.25-0.20 μm . Celles-ci présentent de très fortes contraintes qui seront simulées et étudiées à l'aide d'IMPACT-4. Une confrontation avec des mesures par CBED continuera à être réalisée systématiquement;
- iii) de la fine couche diélectrique appelée ONO ($\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2$) fabriquée dans le but d'isoler la grille flottante de la grille de contrôle, dans les mémoires Flash. La couche d'oxyde supérieure est obtenue par oxydation thermique du nitrure.

La réduction des dimensions fait apparaître des effets qui jusque là étaient négligés (effets tri-dimensionnels...), ce qui peut expliquer la difficulté de reproduire des structures de plus en plus petites. Le développement de simulateurs plus prédictifs implique donc:

- i) soit l'implantation de nouveaux modèles, tels que ceux concernant les contraintes extrinsèques (ce qui constitue le travail de thèse de Thomas Hoffmann, à l'IEMN, Lille, France);
- ii) soit le passage à une résolution tri-dimensionnelle des modèles, bénéficiant des acquis des simulateurs bi-dimensionnels, tout en permettant de reproduire des effets non observables avec des simulateurs 2D [12];
- iii) soit le passage à d'autres types de simulations telles que celles par dynamique moléculaire. Cette dernière permet de simuler au niveau microscopique les interactions entre atomes et leurs déplacements lors notamment de la diffusion d'interstitiels, de la formation de boucles de dislocations... Elle est actuellement en début de développement à l'IEMN, Lille, France.

Très prochainement des structures d'isolement par tranchée, fabriquées chez ST, vont être mesurées par CBED par le laboratoire LAMEL, Bologne, Italie. Mais ce laboratoire mesure aussi des structures présentant une croissance épitaxiale $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$. Les résultats obtenus sont très précieux d'un part pour les entreprises de micro-électronique. Ensuite pour les simulations parce qu'ils fournissent des données permettant de perfectionner la modélisation des contraintes. Enfin, la mesure d'échantillons aussi divers favorise la connaissance de toutes les possibilités du CBED. La technique de mesure s'améliorant, il est devenu possible de générer un faisceau d'électrons de seulement 100 Å de diamètre. Ceci va permettre la mesure des contraintes dans le silicium de structures d'isolement ou non très étroites. Il est même prévu de mesurer les contraintes dans des structures $\text{Si}/\text{InAs}/\text{Si}$ obtenues par épitaxie et dont les motifs *InAs* sont larges de quelques Angströms. Ces structures sont utilisées comme lasers émettant une lumière bleue.

Bibliographie

- [1] K. Kurosawa, T. Shibata, "A New Bird's-beak Free Field Isolation Technology for VLSI Devices", *IEDM'81*, (1981), p. 384.
- [2] J.A. Appels, E. Kooi, "Local Oxidation of Silicon and its Application in Semiconductor-device technology", *Philips Res. Repts*, **25**, (1970), p. 118.
- [3] B. Baccus, D. Collard, P. Ferreira, V. Senez, E. Vandebossche, "IMPACT-4: Isen Modeling Package For Integrated Circuit Technology, Version 4.8.1", (11/1996).
- [4] B.E. Deal, S.S. Grove, "General relationship for the thermal oxidation of Si", *J. Appl. Phys*, **36**, (1965), p. 3770-3778.
- [5] D.B. Kao, J.P. McVittie, W.D. Nix, K.C. Saraswat, "2-D thermal oxidation of Si - part I; experiments", *IEEE Trans. Elec. Dev.*, **34**, no. 5, (1987) p. 1008-1017.
- [6] D.B. Kao, J.P. McVittie, W.D. Nix, K.C. Saraswat, "2-D thermal oxidation of Si - part II; modeling stress effects in wet oxides", *IEEE Trans. Elec. Dev.*, **35**, no. 1, (1988) p. 25.
- [7] E. Carniti, M. Cecchetti, "Ulysses, User's Guide, Version 2.0", *IMEC-STMicroelectronics, Belgique-France*, (06/1993).
- [8] J.R. Pfister, P.U. Kenkare, R. Subrahmanyam, J.H. Lin, P. Crabtree, *Digest of VLSI, Tech. Symposium*, (1993), p. 139.
- [9] A. Tixier, V. Senez, B. Baccus, A. Marmiroli, "Implementation of Nitride Oxidation in the 2D Process Simulator IMPACT-4", *SISPAD'96*, (1996).
- [10] A. Tixier, V. Senez, B. Baccus, A. Marmiroli, G.P. Carnevale, P. Colpani, A. Rebora, "Influence of the Silicon Nitride Oxidation on the Performances of NCLAD Isolation", *ESSDERC'96*, (1996), p. 149.

- [11] A. Armigliato, R. Balboni, S. Frabboni, A. Tixier, G.P. Carnevale, P. Colpani, A. Marmiroli, "Strain in silicon below Si_3N_4 stripes. Comparison between SUPREM-IV calculation and TEM/CBED measurements", *GADEST'97*, (1997).
- [12] V. Senez, S. Bozek, B. Baccus, "3-Dimensional Simulation of Thermal Diffusion and Oxidation Processes", *IEDM'96*, (1996), p. 705.

Summary

STUDY AND CHARACTERISATION OF LOCOS TYPE ISOLATION STRUCTURES FOR THE 0.35 μm CMOS TECHNOLOGY

The reduction of the dimensions in Integrated Circuit (I.C.) Technology improves the performances of the devices and reduces the costs of the manufacturing. For this purpose, the electrical isolation engineering has to be improved since it represents 50% of the surface of an I.C. At ST-Microelectronics (Agrate, Italy), for the 0.35 μm CMOS generation, the recessed-LOCOS type structures, with pitches from 1.30 μm to 1.00 μm , processed by selective oxidation of silicon, are manufactured. Their optimization has been performed using a technology simulation tool: IMPACT-4 which allows to reduce the time and cost of development. In this study, we have analyzed: i) the topography of the structures, ii) the stresses generated in the silicon substrate. We have fully calibrated the model of oxidation of silicon, using a Response Surface Modelling method. This calibration allowed us to study the NCLAD structure, a candidate for the isolation in the CMOS 0.35 μm . However, the simulation of this structure needed the research and the implantation of a model for the oxidation of the nitride. Following this, the study showed that, for dimensions used for CMOS 0.35 μm , this structure didn't improve perceptibly the topography, in comparison with recessed-LOCOS usually used. So it won't be chosen for the CMOS 0.35 μm . Finally, the calculation of the stresses has been compared with the measurements realized with Convergent Beam Electron Diffraction (CBED), showing a good agreement. The CBED is a new technics, very promising for the industry of the I.C. to study the stresses in very small systems.

Key Words

Isolation Structures
Silicon Oxidation
Response Surface Modeling
Convergent Beam Electron Diffraction

Technology Simulation
Nitride Oxidation
Calibration
Stress

Résumé

La réduction des dimensions des dispositifs électroniques, entraînant une augmentation de l'intégration, les rend plus performants et réduit les coûts de la fabrication. Ainsi l'amélioration des techniques d'isolation, afin d'optimiser des structures d'isolement de plus en plus étroites, est nécessaire. Pour la génération CMOS 0.35 μm , chez ST-Microelectronics à Agrate, des structures de type LOCOS enterré de largeur 1.30 μm à 1.00 μm , et obtenues par oxydation sélective du silicium, sont utilisées. Leur étude a nécessité l'utilisation du programme de simulation de technologie IMPACT-4, réduisant ainsi le temps et le coût du développement. L'étude réalisée dans ce mémoire s'effectue: i) sur la topographie des structures, ii) sur les contraintes générées dans le substrat de silicium au cours de la fabrication. Or l'utilisation prédictive d'un programme de simulation réclame la calibration de certains paramètres pour la technologie utilisée. La calibration de paramètres non mesurables utilisés dans les modèles d'oxydation du silicium a donc été réalisée à l'aide d'une Technique de Régression Statistique. L'ajustement de ces paramètres a ensuite permis l'étude topographique par simulation d'une nouvelle structure d'isolement: le NCLAD. Son masque de nitrure encapsulé permet de réduire l'oxydation dans les zones non sélectionnées. Pendant la fabrication de ces structures, il s'oxyde ce qui a pour conséquence de modifier son efficacité. Pour reproduire cet effet, l'oxydation du nitrure a été modélisée et implantée dans IMPACT-4. Un autre critère d'optimisation est le niveau des contraintes générées dans le substrat au cours de la fabrication favorisant les défaillances des dispositifs. Leurs valeurs peuvent être prédites par simulation. La précision de leur calcul a été vérifiée par une confrontation avec des mesures donnant un assez bon accord. Les mesures ont été obtenues par une technique originale: la Diffraction Electronique par Faisceau Convergent (CBED).

Mots Clés

Structures d'Isolement
Oxydation du Silicium
Technique de Régression Statistique
Diffraction Electronique par Faisceau Convergent

Simulation de Technologie
Oxydation du nitrure
Calibration
Contraintes

