

50376  
1999  
399

N° d'ordre :



# THESE

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

Spécialité : ELECTRONIQUE

par

**PAUL FERREIRA**

Ingénieur de l'Institut Supérieur d'Electronique du Nord

### INTRODUCTION DU CALCUL MÉCANIQUE GÉNÉRALISÉ DANS LA SIMULATION BIDIMENSIONNELLE DE PROCÉDÉS TECHNOLOGIQUES SILICIUM

Soutenance le 03 Novembre 1999, devant la commission d'examen :

Président	:	M. G. SALMER
Rapporteurs	:	M. Y. BERTRAND MME. K. KETATA
Directeur de la recherche:		M. D. COLLARD
Co-responsable de thèse:		M. V. SENEZ
Examineurs	:	M. J. LEBAILLY M. B. LEROY

à Rémi et Lorraine,  
à Christèle.

à mes parents.

Cette thèse a été préparée à l'Institut Supérieur d'Electronique du Nord  
au sein du laboratoire de  
l'Institut d'Electronique et de Micro-électronique du Nord,  
(IEMN - UMR/CNRS 8520).

Le travail de thèse a été initié en septembre 1993 et s'est déroulé dans  
cette structure jusqu'en septembre 1996, date à laquelle j'ai rejoint  
l'Usine de Corbeil Essonnes, d'IBM Microelectronics, sur le projet de  
fabrication de mémoires DRAM 64Meg.

D'abord en charge des procédés de recuits et oxydations rapides (RTA  
et RTO), j'ai en septembre 1998 rejoint l'équipe de transfert et de  
développement sur le site d'Essonnes de la technologie CMOS logique  
0.18 microns à métallurgie cuivre, responsable en particulier des étapes  
liées à la fabrication du dispositif élémentaire.

En parallèle à cette activité industrielle, j'ai poursuivi mon travail de  
thèse, afin de rédiger le manuscrit de synthèse.

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

*Je tiens à remercier vivement Monsieur Y. BERTRAND et Madame K. KET-ATA qui ont accepté d'être les rapporteurs de ce travail.*

*Monsieur B. LEROY d'IBM Microelectronics m'a fait l'honneur de participer à mon jury de thèse. Je l'en remercie très sincèrement.*

*J'exprime toute ma gratitude à Monsieur M. LANNOO, directeur du laboratoire de l'ISEN, et Monsieur A. KAISER, responsable de l'équipe de recherche, pour l'accueil qu'ils m'ont réservé au sein de l'équipe et la confiance qu'ils m'ont témoigné, notamment au cours de ces trois dernières années.*

*Ma participation à la longue collaboration entre le site de Caen de Philips Composants et l'Institut Supérieur d'Electronique du Nord a été pour moi un signe de reconnaissance de l'intérêt industriel du travail effectué et un motif d'enthousiasme. Je remercie Messieurs J. LEBAILLY, M. BRAULT et Madame S. BOSQUET pour leur contribution à ce travail de thèse.*

*Ma collaboration avec le site de Crolles de ST Microelectronics a été également une expérience très enrichissante. Que Messieurs E. VANDENBOSSHE et H. JAOUEN en soient remerciés.*

*Je tiens tout spécialement à remercier Monsieur V. SENEZ, qui m'a largement conseillé et aidé tout au long de ce travail, en particulier lors de la phase de rédaction. Sans sa confiance, son soutien constant et sa persévérance, ce travail n'aurait jamais abouti. Qu'il soit tout entier associé à la réussite de cette thèse. Je le remercie également pour l'amitié qu'il a su créer et maintenir tout au long de ce travail. Qu'elle se poursuive dans de nouvelles collaborations!*

*Monsieur D. COLLARD a été l'instigateur de ce travail. Qu'il soit remercié pour la confiance qu'il m'a accordé en initiant avec moi cette thèse.*

*Je voudrais également saluer la contribution de Monsieur B. BACCUS.*

*Enfin, je terminerai par signaler l'excellente ambiance de travail qui règne au sein du département d'électronique de l'ISEN, basée sur des relations professionnelles mais aussi amicales et en remercier pour cela toute l'équipe.*

*Ce travail s'est déroulé dans le cadre d'une Bourse de Doctorat pour Ingénieur, financée par le Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique.*

# Sommaire

---

<b><u>Chapitre 1: Introduction</u></b>	<b>7</b>
I-1. Evolution Historique du Secteur de la Fabrication des Composants Microélectroniques	8
I-2. Evolution des Procédés de Fabrication de Circuits sur Silicium	10
I-3. L'Apport de la Simulation	11
I-4. L'Importance des Contraintes Mécaniques dans les Procédés Modernes sur Silicium	12
I-5. Description du Travail de Thèse et Enoncé du Plan du Manuscrit	14
<b>Références bibliographiques</b>	<b>16</b>
<b><u>Chapitre 2: Origines des Contraintes Mécaniques</u></b>	<b>19</b>
II-1. Les Contraintes d'Origine Thermiques	21
II-2. Les Contraintes Intrinsèques	24
II-3. Les Contraintes dûes aux Gravures	27
II-4. Les Contraintes dûes aux Oxydations non-Planes	28
II-5. Les Contraintes Extrinsèques	30
II-6. Les Contraintes dûes aux Implantations et aux Hétéroépitaxies	32
II-7. Méthode de Détermination des Contraintes par Mesure de la Courbure des Tranches de Silicium	33
<b>Références bibliographiques</b>	<b>36</b>

## **Chapitre 3: Notions de Base de la Mécanique des Matériaux** 39

III-1. Le Tenseur Contrainte	40
III-1.1 Définition	40
III-1.2 Expression du Tenseur des Contraintes	41
III-2. Déformations dans un Milieu Continu	42
III-2.1 Définition	42
III-2.2 Expression de la Déformation en un Point	43
III-3. Principe Fondamental d'Equilibre Mécanique	44
III-4. Notions de Rhéologie Appliquée aux Matériaux de la Microélectronique	46
III-4.1 Le Comportement Elastique Linéaire	48
III-4.2 Le Comportement Visqueux	48
III-4.3 Le Comportement Plastique	49
III-4.4 Le Comportement Viscoélastique	51
III-4.5 Le Comportement Elasto-Plastique	54
III-5. Conclusion: Validité de l'Analyse Rhéologique Exposée	57

## **Références bibliographiques** 58

## **Chapître 4: L'Approche Numérique dans IMPACT-4** 59

IV-1. Formulation du Principe d'Equilibre par le Formalisme des Eléments Finis	60
IV-2. Cas des Déformations Elastiques	63
IV-3. Cas des Déformations Viscoélastiques	64
IV-3.1 Continuité du Modèle Viscoélastique	67
IV-3.2 Effet des Contraintes sur la Viscosité	68
IV-4. Déformations Plastiques du Silicium	70
IV-5. Algorithmes de Calcul	74

IV-6. Le Maillage	75
IV-7. La Résolution Numérique	77
<b>Références bibliographiques</b>	<b>81</b>
<b><u>Chapitre 5: Calibration du Modèle Mécanique</u></b>	<b>83</b>
V-1. Calibration des Oxydes Thermiques	85
V-2. Calibration des Oxydes Dopés Déposés par APCVD (Atmospheric Pressure Chemical Vapor Deposition)	90
V-3. Calibration du Nitrure	95
V-4. Contraintes Intrinsèques	100
<b>Références bibliographiques</b>	<b>102</b>
<b><u>Chapitre 6: Applications</u></b>	<b>104</b>
VI-1. Analyse des Contraintes dans un Procédé BICMOS à Isolation par LOCOS	105
IVI-1.1 Descriptif du Procédé Simulé	105
IVI-1.2 Evolution des Contraintes au cours du Procédé	108
IVI-1.3 Application à la Technologie des DMOS	115
VI-2. Analyse des Contraintes dans un Procédé CMOS	119
VI-2.1 Descriptif des Etapes du Procédé	120
VI-2.2 Contrainte Induite par la Formation de l'Empilement du PBL	121
VI-2.3 Distribution des Contraintes après la Suppression des Films de Nitrure et de Polysilicium	127
VI-2.4 Simulation des Oxydations Sacrificielles avant Formation de la Grille	128
VI-2.5 Formation de la Grille	132
<b>Références bibliographiques</b>	<b>135</b>
<b><u>Chapitre 7: Conclusions</u></b>	<b>136</b>

# Chapitre 1

---

## *I- Introduction*

*De par la complexité des procédés modernes de fabrication des circuits intégrés, l'utilisation d'outils informatiques d'aide aux développements (CAD et TCAD) s'avère de plus en plus indispensable. Ces outils permettent de minimiser le nombre d'expériences nécessaires à la mise au point d'une nouvelle filière technologique. Ils sont une aide au diagnostic des dégradations de caractéristiques électriques d'un dispositif ainsi qu'un outil précieux pour une meilleure compréhension des phénomènes physiques mis en jeu. Dans ce but, la simulation doit être supportée par une modélisation avancée permettant de prendre en compte des phénomènes complexes. La modélisation fine des aspects mécaniques intervenant dans la fabrication de structures microniques entre dans ce cadre et est devenue en quelques années aussi importante que la prédiction des topographies et profils de dopage.*

*Ce chapitre introduit l'ensemble du travail de modélisation et de simulation des contraintes mécaniques réalisé au cours de cette thèse. Il présente finalement le plan du manuscrit.*



## ***I-1 Evolution Historique du Secteur de la Fabrication des Composants Microélectroniques***

L'industrie des semiconducteurs a connu une évolution technologique fulgurante depuis les années 60.

Les besoins des utilisateurs professionnels des systèmes de traitement de l'information, leurs exigences en terme de puissance de calcul et de capacité mémoire, sont le moteur principal de cette course à l'intégration et à la complexité. A ce titre, l'exemple des mémoires (DRAMs, SRAMs, EEPROMs) et des circuits logiques ASICs (Application-specific ICs) est souvent pris pour illustrer les innovations technologiques.

Il est intéressant de noter cependant que le secteur de l'électronique grand public se positionne actuellement comme l'un des nouveaux demandeurs de progrès technologiques importants dans l'industrie des semiconducteurs [1]. Ce secteur a pendant longtemps intégré les évolutions technologiques dans le sillage de l'industrie informatique. Avec l'avènement des techniques digitales et de l'ère du multimédia, la plupart de ces produits (hi-fi, télévision, micro-informatique ou jeux interactifs), fait maintenant appel aux dernières évolutions des technologies microélectroniques [2]. Ce secteur est ainsi devenu un consommateur important en circuits intégrés. Ses exigences économiques en terme de coût de revient, fiabilité et de consommation [3] se généralisent entraînant de sérieux défis à l'industrie des semiconducteurs.

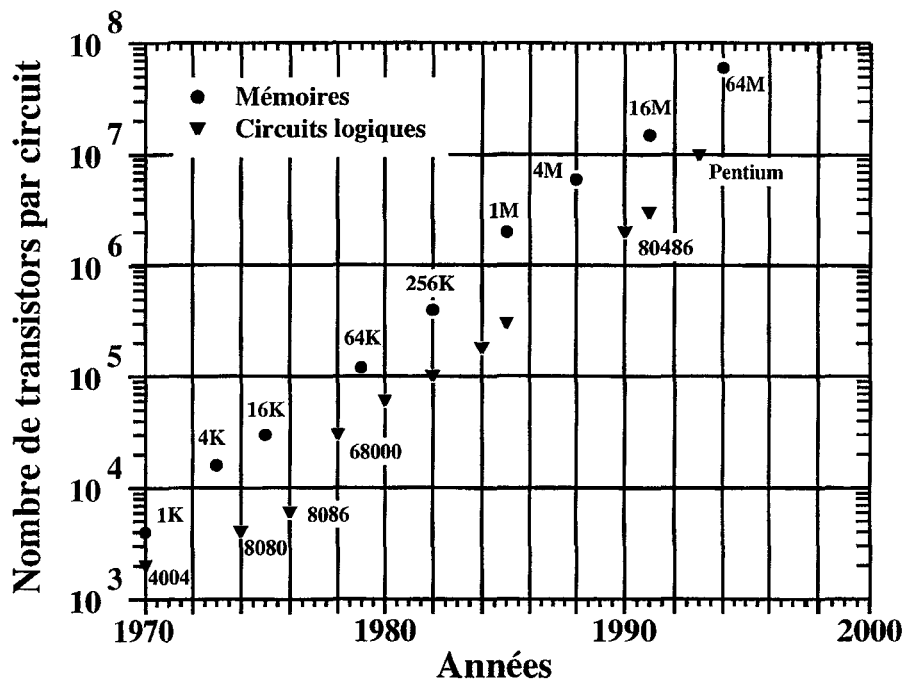
De plus, un examen attentif des produits microélectroniques montre que les frontières entre les différentes branches de l'électronique (électronique grand public, systèmes informatiques, télécommunications) tendent à disparaître, chaque domaine utilisant des technologies très proches [1].

Pour répondre à ces exigences, les matériaux, les équipements et les procédés technologiques utilisés dans la fabrication des circuits intégrés sont en constante progression. Les principales évolutions concernent:

1- Le diamètre des tranches de silicium. Celui-ci a augmenté considérablement afin de pouvoir accroître le nombre de circuits fabriqués sur un même substrat, et ainsi de réduire les coûts de fabrication. On est passé en 10 ans d'un diamètre de 3 pouces (75 mm) à des diamètres de 8 pouces (200mm), utilisés en production actuellement, et on envisage déjà le passage à des diamètres supérieurs de 12 pouces (300mm) voire 16 pouces (400mm) [4].

2- La diminution de la taille des motifs élémentaires, qui constitue l'approche principale pour augmenter les performances. La plupart des efforts en recherche et développement se sont concentrés sur cet aspect. La diminution des motifs élémentaires permet non seulement d'atteindre de très grandes densités d'intégration, mais aussi d'améliorer les vitesses de fonctionnement des circuits et de réduire leur consommation. Cette évolution requiert un raffinement de plus en plus important des procédés de fabrication, c'est à dire une amélioration des techniques à chaque niveau du procédé et un contrôle plus fin des paramètres technologiques (profondeur de jonction, épaisseur d'oxyde, ...). Ainsi, on observe historiquement que les dimensions des structures sont réduites de 33% tous les trois ans en accord avec la loi prédite par G.E. Moore [5]. Pour illustrer l'évolution des règles de dessin liées aux circuits

microélectroniques, l'exemple des mémoires DRAM (Dynamic Random-Access Memory) et des microprocesseurs est significatif (Figure I-1). Les premiers circuits de l'ère VLSI (DRAM 1Mbits), commercialisés en 1985, utilisaient environ 2 millions de transistors avec une technologie 1.0  $\mu\text{m}$ . Sept ans plus tard, les DRAM 16Mbits, en technologie 0.5  $\mu\text{m}$  étaient disponibles [6]. Actuellement, des motifs inférieurs à 0.2  $\mu\text{m}$  sont utilisés pour le développement de circuits mémoire DRAM de 1 Gigabits [7]. On peut noter également que, depuis le début des années 1990, un infléchissement de cette progression est enregistré, lié plus à des considérations d'ordre économiques que technologiques [6]. L'évolution de la densité d'intégration des circuits logiques suit la même tendance, restant cependant en deçà des performances atteintes pour les DRAMs [8].



**Figure I-1:** Evolution du nombre de transistors dans les circuits mémoire et logiques au cours des trente dernières années.

3- Le nombre de niveaux de masque. Les procédés utilisant plus d'une quinzaine de niveaux différents sont maintenant communs. A titre d'exemple, on peut citer le procédé QUBIC1 de PHILIPS, qui utilise 21 niveaux de masquage, dont 15 pour le composant (front-end) et 6 pour les connections (back-end) [9]. Cette augmentation est liée aux progrès des technologies d'interconnexions des transistors (structure double Damascene, Chemical Mechanical Polishing (CMP), ...), qui permettent d'empiler couramment 4 voire 5 niveaux de métal [10].

4- Les équipements. Les technologies actuelles (inférieures à 0.5  $\mu\text{m}$ ) nécessitent des salles blanches de classe 1, qui permettent d'éliminer les particules de taille supérieure à 0.2  $\mu\text{m}$ . De plus, chaque nouvelle génération de procédés demande une nouvelle évolution des techniques très sophistiquées et très coûteuses de lithographie. L'ensemble des équipements nécessaires à l'exploitation d'une nouvelle filière technologique devient très lourd et constitue un frein économique important. On évalue ainsi que l'investissement nécessaire pour ouvrir une nouvelle usine de fabrication, estimé à un million de dollars en 1994 sera

de plus de deux millions de dollars en l'an 2000 [11].

## ***I-2 Evolution des Procédés de Fabrication de Circuits sur Silicium***

La mise au point des composants actuels, fortement submicroniques, a été rendue possible grâce à l'amélioration des différentes étapes des procédés et au meilleur contrôle des très nombreux paramètres technologiques (dose et énergie d'implantation, temps et températures de recuits, épaisseurs des couches, ...).

Les efforts technologiques se sont, entre autres, portés sur :

- Les techniques de masquage. En augmentant la résolution des procédés lithographiques (diminution de la longueur d'ondes des rayons lumineux, modification des structures optiques), et en utilisant des résines aux performances photosensibles meilleures, on a pu reproduire des motifs de taille inférieure à 140 nm (248 nm DUV).

- Les techniques de gravure. L'utilisation des techniques sèches, ayant une meilleure sélectivité et uniformité contribue également à la reproduction de motifs de plus en plus fins.

- Les techniques de dopage. Les étapes d'implantation et de diffusion des dopants sont critiques sur un procédé. Les profils de dopage influent en effet fortement sur les caractéristiques électriques des composants (gains, capacités base/collecteur, capacités base/émetteur, résistances d'accès). La formation de jonctions peu profondes, un meilleur contrôle de ces jonctions sont obtenus grâce aux techniques de recuit thermique rapide (RTA), à l'utilisation de substrats préamorphisés, à l'introduction de composés (ex.: BF<sub>2</sub>).

- Les techniques d'isolation. Les isolations par oxyde épais de type LOCOS (LOCAl Oxidation of Silicon) s'étant généralisées [12], de nombreux travaux ont porté sur l'amélioration de ces structures. Des topologies plus ou moins complexes ont été proposées, afin d'une part de réduire l'espace de transition entre les zones actives et l'oxyde épais ("bec d'oiseau") et d'autre part de minimiser les cycles thermiques après la formation des zones implantées. Des techniques dites de type "LOCOS avancées" sont ainsi apparues (PBL [13], SILO [14], LOCOS enterré [15]). Parallèlement, des techniques basées sur une gravure plus ou moins profonde du silicium, appelée "Tranchées" (Trench, Shallow Trench) [16], apparaissent de plus en plus dans des circuits spécifiques de type bipolaires, mémoire ou encore SOI (Silicon On Isolation) [17] et remplacent même le LOCOS pour les technologies les plus avancées (CMOS 0.25 µm) [18]. Ces techniques permettent une très grande intégration, mais sont particulièrement difficiles à maîtriser.

- Les techniques liées aux interconnexions. Grâce aux progrès dans ce domaine, des circuits à plusieurs niveaux de métal (4 à 5 niveaux sur des structures 0.35 µm) ont pu être réalisés [10]. Il est pour cela nécessaire d'introduire de nouveaux matériaux tels que les siliciures (TiSi<sub>2</sub>, CoSi<sub>2</sub>), le tungstène ou autres composés métalliques, tout en améliorant les étapes de planarisation par pelliculage de SOG ou polissage physico-chimique (CMP). Plus

récemment, l'introduction du cuivre en remplacement de l'aluminium a ouvert de nouveaux horizons pour la miniaturisation de ces interconnexions.

En amont, le développement d'un procédé technologique nécessite l'établissement d'une méthodologie rigoureuse compte tenu du nombre très important de paramètres à contrôler [19]. Ceci est d'autant plus difficile que le nombre de paramètres critiques augmente fortement dans les procédés modernes. L'épaisseur de la couche épitaxiée, les doses d'impuretés pour la formation des zones dopées N/P, des zones de source et drain, les énergies d'implantation, les ajustements des tensions de seuil, les temps ainsi que les températures des recuits, des oxydations, sont autant de données critiques qu'il faut maîtriser. Pour chaque étape, il est donc nécessaire de déterminer un jeu de variables technologiques optimales, et d'analyser la sensibilité électrique du composant à des variations sur ces paramètres technologiques. La mise en place expérimentale de ces tolérances de fabrication requiert un très grand nombre de manipulations.

### ***I-3 L'Apport de la Simulation***

Les outils de simulation associés à des équipements de test et une approche statistique sont devenus des aides importantes au développement des procédés. La simulation technologique des différentes étapes du procédé permet de prédire les caractéristiques physiques du composant: profils de dopage, distribution des contraintes mécaniques et topographie. La simulation de dispositifs exploite ces données et détermine le comportement électrique du composant.

Pour être fiable, la simulation de procédés doit s'appuyer sur une modélisation fine des phénomènes physiques mis en jeu lors de la fabrication du composant ainsi que sur une calibration des paramètres physiques de ces modèles. Cette calibration est primordiale puisqu'elle assure le caractère prédictif des simulations. Elle est aussi très astreignante en ce sens que les coefficients physiques déterminés sont souvent dépendants de la filière technologique étudiée. En effet, les modèles actuellement utilisés ne permettent pas encore de prendre en compte tous les phénomènes physiques intervenant dans la fabrication du circuit. Par conséquent, en fonction des conditions expérimentales et des appareillages, il faudra calibrer à nouveau certains paramètres pour inclure implicitement des phénomènes non modélisés. Cependant, même lorsque la simulation ne reproduit pas exactement les données quantitatives obtenues par mesures, elle permet de prédire les comportements ainsi que les sensibilités aux conditions expérimentales. Ces études variationnelles permettent ainsi de réduire notablement le nombre d'expériences nécessaire au développement d'une nouvelle filière technologique.

Ainsi, en production, les outils de simulation, qui sont alors calibrés pour un procédé donné, permettent de détecter les étapes à l'origine de dérives éventuelles des caractéristiques électriques, et de déterminer les modifications à apporter pour les pallier rapidement.

Enfin, ces simulateurs peuvent être utilisés dans des études en amont et servir de base au travail de modélisation et compréhension des phénomènes physiques mis en jeu au cours de la fabrication des circuits intégrés.

Les premiers travaux de modélisation technologique d'un procédé se sont intéressés aux étapes d'implantation et de recuit (en ambiance inerte ou oxydante) et ont conduit au développement du premier simulateur de procédés, SUPREM II (Université de Stanford, Etats-Unis, 1979). SUPREM-II est un simulateur unidimensionnel, utilisant des modèles analytiques. Actuellement, la connaissance des phénomènes physiques liés à ces trois étapes est très avancée et des modèles numériques ont été implantés dans de nombreux simulateurs: SUPREM IV (Stanford) [20], FEDSS (IBM) [21], PROSE (Berkeley) [22], PROPHET (Lucent Technologies) [23], STORM (Projet européen ESPRIT) [24], IMPACT-4 (ISEN) [25], ATHENA (SILVACO) [26], DIOS (ISE-AG) [27], T-SUPREM4 (AVANT!) [28].

Cependant, un état de l'art actuel [29] fait apparaître de grosses lacunes dans le pouvoir de prédiction des simulateurs de technologies. Les nouvelles possibilités de fabrication sont introduites nettement plus rapidement que leur modélisation. De plus, les conditions extrêmes de fabrication (faible profondeur d'implantation, budgets thermiques réduits, ...) rendent certains phénomènes physiques non-négligeables qui demandent un raffinement supplémentaire des modèles. Enfin, la miniaturisation des composants montre de plus en plus la nécessité d'une analyse tridimensionnelle des problèmes, ce qui, malgré la puissance de l'informatique, reste un grand défi [30]. Néanmoins, on observe que les modèles d'implantation deviennent de plus en plus sophistiqués, avec la détermination des profils implantés par modélisation statistique (Monte Carlo) [31], la modélisation des défauts créés dans le silicium par l'implantation (défauts ponctuels et étendus, zones amorphisées, dislocations, ...) fait désormais l'objet d'étude. De même, la connaissance sur la diffusion des dopants s'affine grâce à l'étude des effets induits par: i) les défauts du silicium [32] et ii) les contraintes mécaniques, ainsi que par l'analyse de la diffusion en fortes concentrations où des phénomènes de précipitation apparaissent [33]. Les études sur l'oxydation s'orientent quant à elles vers la prise en compte des effets des contraintes mécaniques sur la cinétique, ainsi que sur une meilleure modélisation rhéologique des matériaux en couches minces [34].

#### ***I-4 L'Importance des Contraintes Mécaniques dans les Procédés Modernes sur Silicium***

L'introduction des aspects mécaniques est actuellement un des axes importants en simulation de procédés. Les problèmes liés aux contraintes mécaniques ne sont pas récents [35]. Dès la mise au point des premiers procédés de fabrication des circuits intégrés, les technologues ont observé l'apparition de défauts de fabrication d'origine mécanique: dislocations, défauts cristallins, ruptures de couches de diélectriques ou de lignes métalliques. Ces défauts donnent généralement lieu ensuite à des dysfonctionnements des composants (courants de fuite importants, courts-circuits ou circuits ouverts ...). Cependant, sur les premières générations de circuits intégrés, ces aspects n'étaient pas critiques puisque des variations sur les procédés ont permis de les surmonter facilement.

La diminution des dimensions des composants intégrés, la complexité des procédés a fait réapparaître ces problèmes d'origine mécanique. Ceux-ci sont devenus d'autant plus critiques que les variations possibles sur un procédé deviennent limitées. Les facteurs à l'origine de cette augmentation des niveaux de contraintes mécaniques sont très divers et inter-

viennent à tous les niveaux du procédé. Ainsi, la réduction des budgets thermiques et l'introduction des techniques de recuits thermiques rapides (RTA) pour un meilleur contrôle des zones de diffusion imposent aux matériaux des chocs thermiques brutaux et donc génèrent des contraintes élevées. De même, la création de géométries très perturbées, notamment par la formation de structures d'isolation complexes, la nécessité d'introduire des étapes de planarisation avant la métallisation, l'utilisation d'une variété de matériaux de plus en plus grande, aux propriétés physiques et rhéologiques souvent différentes sont autant de facteurs favorables à une forte augmentation des niveaux de contraintes dans le substrat.

De plus, l'effort continu qui vise à réduire les temps de mise au point d'une nouvelle filière technologique est un facteur non négligeable qui accroît sensiblement la difficulté du contrôle des procédés. En effet, la plupart des problèmes induits par les contraintes mécaniques générées lors de la fabrication des composants apparaissent au cours de l'utilisation des circuits. Leur détection nécessite donc des tests draconiens, souvent longs, sur des circuits pilotes. Si le problème n'est pas détecté au cours du cycle de production, les conséquences économiques peuvent être catastrophiques [36]. Pour répondre à ce problème, la tendance actuelle chez les fabricants de circuits intégrés est de réduire, voire éliminer, les tests de fiabilité sur les circuits en fin de chaîne de production, qui sont très difficiles à exploiter rapidement, au profit de tests "on-line", réalisés pendant le cycle de fabrication, beaucoup plus fins et autorisant des temps de réaction plus courts.

Pour cela, et afin d'éviter la détection tardive de ces problèmes d'origine mécanique, il est capital de disposer d'une connaissance approfondie des différentes sources de contraintes, de comprendre clairement le comportement des matériaux utilisés lorsqu'ils sont soumis à des niveaux de contraintes élevées, et d'analyser les interactions entre matériaux au niveau des interfaces. Ce travail permet alors l'évaluation des seuils de contraintes à ne pas dépasser, sous peine de génération de mécanismes de dislocation ou de rupture, et de détecter les étapes critiques du procédé, génératrices des maximums de contraintes, étapes sur lesquelles une attention particulière peut alors être portée. Avec ces connaissances et des outils de modélisation adéquats, la minimisation des contraintes mécaniques peut être prise en compte dans la conception des composants.

Les contraintes mécaniques générées au cours d'un procédé influent à la fois sur les mécanismes physiques et chimiques lors de la fabrication du composant et sur le fonctionnement électrique de celui-ci.

Ainsi par exemple, il est maintenant reconnu que les mécanismes de diffusion des dopants dans le substrat sont perturbés par la présence de contraintes mécaniques dans le silicium [37][38][39].

De même, les contraintes mécaniques modifient notablement le phénomène d'oxydation en agissant à la fois sur la diffusion des agents oxydants vers l'interface Si/SiO<sub>2</sub>, sur les coefficients de réaction à cette interface et sur les comportements mécaniques du dioxyde de silicium formé. L'influence des contraintes sur l'étape d'oxydation a été très rapidement soupçonnée. De nombreux travaux de recherche ont été ainsi menés sur ces aspects, motivés par un besoin de modéliser quantitativement l'étapes d'oxydation de champs [40] [41].

Sous l'influence de contraintes mécaniques élevées, des défauts ponctuels en forte concentration, introduits par exemple lors d'une étape d'implantation, peuvent nucléer en boucles de dislocations [42]. Ces distortions locales du réseau cristallin peuvent avoir des conséquences critiques lors du fonctionnement électrique du composant en favorisant notamment

l'apparition de courants de fuite.

Finalement, du point de vue purement électrique, les contraintes mécaniques ou plus précisément les déformations résiduelles du silicium induisent des changements dans les caractéristiques électriques des transistors, en modifiant la structure de bande du semiconducteur, les mobilités électroniques, les phénomènes de génération et de recombinaison [43]. Par exemple, des fluctuations sur les valeurs de la conductance ont été observées par Takeuchi et Newbury, sur des structures MOSFET très avancées, dont l'origine serait l'apparition de puits de potentiel créés par ces déformations permanentes [44].

En conclusion, on s'aperçoit que l'optimisation de structures microélectroniques passe maintenant aussi par l'étude et la réduction des contraintes et déformations mécaniques générées lors de la fabrication des composants. Les outils modernes d'aide à la conception et au développement doivent donc prendre en compte ces aspects mécaniques de façon la plus générale possible. L'obtention de la distribution exacte des contraintes à la fin du procédé de fabrication ainsi que la détection des étapes critiques en termes de maximums de contraintes passent par l'analyse de l'historique de l'évolution de ces contraintes au cours du processus.

## ***I-5 Description du Travail de Thèse et Enoncé du Plan du Manuscrit***

Le travail réalisé au cours de cette thèse a consisté dans un premier temps à analyser et à comprendre les phénomènes générateurs de contraintes mécaniques et ensuite à concevoir une modélisation de ces mécanismes. Les propriétés rhéologiques des matériaux ont été également finement modélisées afin de pouvoir calculer avec précision la distribution des champs de contraintes mécaniques au cours de la fabrication des composants microélectroniques intégrés. Les algorithmes permettant ces calculs ont été établis et inclus dans un simulateur bidimensionnel de procédés technologiques, utilisant une discrétisation spatiale de type éléments finis.

Ce manuscrit reprend l'ensemble de ce travail de recherche et en résume l'essentiel des résultats. Il s'articule en cinq parties.

Le second chapitre passe en revue les différentes origines des contraintes mécaniques dans la technologie silicium. Une analyse globale des problèmes mécaniques nécessite la prise en compte de l'ensemble de ces sources de contraintes.

La modélisation de ces phénomènes mécaniques et des comportements rhéologiques des matériaux utilisés est détaillée dans le troisième chapitre. A partir des notions générales sur les contraintes et les déformations, les lois régissant l'équilibre mécanique statique au sein de la structure sont exposées. La résolution des équations d'équilibre ainsi introduite nécessite l'établissement des propriétés rhéologiques des matériaux. Ceci fait l'objet de la dernière partie de ce chapitre.

La discrétisation spatiale et temporelle des équations traduisant les phénomènes générateurs de contraintes mécaniques est introduite au quatrième chapitre. Le logiciel qui a

servi de plateforme de développement à ce travail est IMPACT-4 [45].

Le cinquième chapitre traite de la calibration de ces modèles afin de proposer aux utilisateurs une prédiction la plus précise possible des niveaux de contraintes mécaniques. Après avoir identifié les paramètres à calibrer, on rapporte quelques résultats concernant les oxydes thermiques et déposés ainsi que le nitrure. Finalement, une attention particulière est portée sur la contrainte intrinsèque au sein de ces matériaux.

Finalement, le dernier chapitre de ce mémoire consiste en une présentation des nouvelles fonctionnalités du logiciel IMPACT-4. Pour cela, des études réalisées pour des partenaires industriels sont résumées. La première concerne une technologie BICMOS exploitée par Philips Composants à Caen. La seconde s'est intéressée à une technologie CMOS développée par ST-Microelectronics à Crolles.

Enfin, la conclusion de ce mémoire dresse le bilan de ce travail et définit les axes à approfondir.



# Références Bibliographiques du Chapitre 1

- [1] Y. Hashimoto, "Consumer Electronics as the Technology Driver", Proceedings of IEDM'95, p.3, 1995.
- [2] E.A. Sack, "Consumer Electronics : an Important Driver of Integrated Circuit Technology", Proceedings of the IEEE, vol. 82, no. 4, p. 465, April 1994.
- [3] P. K. Chatterjee, "ULSI CMOS - The Next Ten Years", Proceedings of ESSDERC'92, p. 3, 1992.
- [4] D. J. Elliott, "Integrated Circuits Fabrication Technology", McGraw-Hill Eds, Second Edition, 1989.
- [5] G.E. Moore, IEEE Spectrum, vol. 16, No. 4, p. 30, 1979.
- [6] K. Hashimoto, and M. Kashiwagi, "ULSI Research and Development in Japan", Proceedings of the Fourth Intern. Symp. on Ultra Large Scale Integration Science and Technology, The Electrochem. Soc. Proceedings, vol. 93-13, p. 30, 1993.
- [7] M. Horiguchi et al., "An experimental 220MHz 1Gbit DRAM". Proceedings of the International Solid-State Circuits Conference, p. 254, 1995.
- [8] J.P. Colinge and F. Van de Wiele, "Physique des Dispositifs Semi-Conducteurs", Ed. De Boeck Université, p. 136, 1996.
- [9] J. Lebailly, Communications privées - Philips Composants, Centre de Caen.
- [10] P. Felix, "Interconnects for ULSI: State of the Art and Future Trends", Proceedings of ESSDERC'95, pp.5-14, 1995
- [11] H. R. Huff, "Silicon Materials For The Mega-IC Era", Proceedings of the Fourth Intern. Symp. on Ultra Large Scale Integration Science and Technology, The Electrochem. Soc. Proceedings, vol. 93-13, p. 103, 1993.
- [12] S. Deleonibus, "Field Isolation for the Gigabit Era Devices", Proceedings of ESSDERC'93, p. 391, 1993.
- [13] M. Ghezzeo, E. Kaminsky, Y. Nissan-Cohen, P. Frank and R. Saia, "LOPOS: Advanced Device Isolation for 0.8  $\mu\text{m}$  CMOS/Bulk Process Technology", Journal of the Electrochemical Society, vol. 136, no. 7, p. 1992, 1989.
- [14] P. Molle, S. Deleonibus and F. Martin, "Sealed Interface Local Oxidation by Rapid Thermal Nitridation", Journal of the Electrochemical Society, vol. 138, no. 12, p. 3732, 1991.
- [15] N. Shimizu, Y. Naito, Y. Itoh, Y. Shibata, K. Hashimoto, M. Nishio, A. Asai, K. Ohe, H. Umimoto and Y. Hirofuji, "A Poly-Buffer Recessed LOCOS Process for 256 Mbit DRAM Cells", Proceedings of the IEDM 92, p. 279, 1992.
- [16] K. Shibahara, Y. Fujimoto, M. Hamada, S. Iwao, K. Tokashiki and T. Kunio, "Trench Isolation with NABLA-shaped buried Oxide for 256 Megabit DRAMS", Proceedings of the IEDM 92, p. 275, 1992.

- [17] D.J. Schepis et al., "A 0.25  $\mu\text{m}$  CMOS SOI Technology and its Application to 4 Mb SRAM", Proceedings of IEDM 97, p. 587, 1997.
- [18] N. Nandakumar et al., "A Shallow Trench Isolation for sub-0.13  $\mu\text{m}$  CMOS Technologies", Proceedings of IEDM 97, p. 657, 1997.
- [19] A. R. Alvarez, "BICMOS Technology and Applications", Kluwer Academic Publishers, chapitre 3, p. 63, 1989.
- [20] J.D. Plummer, "Process Simulation in Submicron Silicon Structures", Proceedings of the Fourth International Symposium on Ultra Large Scale Integration Science and Technology, p. 93, 1993.
- [21] K.A. Salsburg and H.H. Hansen, "FEDSS-Finite Element Diffusion Simulation System", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 30, p. 1004, September 1983.
- [22] A. Neureuther, R. Wang, J. Helmsen, "Perspectives on TCAD Integration at Berkeley", Proceedings of Workshop on Technology CAD Systems, SISDEP93, pp.75-83, 1993.
- [23] M.R. Pinto, C.S. Rafferty, R.K. Smith, J. Bude, "ULSI Technology Development by Predictive Simulation", Proceedings of the IEDM 93, p. 701, 1993.
- [24] S.K. Jones, C. Lombardi, A. Poncet, C. Hill, H. Jaouen, J. Lorenz, C. Lyden, K. De Meyer, J. Pelka, M. Rudan and S. Solmi, "STORM : A European Platform for Sub-Micron Technology Simulation and Optimisation", Proceedings of the ESSDERC'93, p. 505, 1993.
- [25] B. Baccus, E. Dubois, D. Collard and D. Morel, "Efficient Two Dimensional Multilayer Process Simulation of Advanced Bipolar Devices", Solid-State Electro., vol. 32, p. 1013, 1989.
- [26] ATHENA Reference Manual, SILVACO International, Santa Clara, USA, Release 3, 1995.
- [27] DIOS Reference Manual, ISE Integrated System Engineering AG, Zurich, Switzerland, Release 5, 1999.
- [28] T-SUPREM4 Reference Manual, Technology Modeling Associates Inc., Sunnyvale, USA, Release 4, 1997.
- [29] L. Borucki, "Living in an Expanding TCAD Space", Proceedings of MSM 99, pp. 4-7, San Juan, Porto Rico, April 1999.
- [30] M. Orłowski, "Challenges for Process Modeling and Simulation in th 90's: an Industrial Perspective", Proceedings of SISDEP 1991, vol.4, pp. 3-22, 1991.
- [31] W. Bohmayr, A. Bourenkov, J. Lorenz, H. Ryssel and S. Selberherr, "Trajectory Split Method for Monte Carlo Simulation of Ion Implantation", IEEE Trans. Semiconductor Manufacturing, vol. 8, no. 4, p. 402, 1995.
- [32] E. Lampin, V. Senez and A. Claverie, "Modeling of the Transient Enhanced Diffusion of Boron Implanted into Preamorphized Silicon", J. Appl. Phys., vol. 85, no. 12, p. 8137, 1999.

- [33] E. Vandenbossche, "Contribution à la Modélisation de la Diffusion des Dopants en Fortes Concentrations dans le Silicium", Thèse présentée à l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres-Artois, no. d'ordre 1391, Novembre 1994.
- [34] V. Senez, "Modélisation Bidimensionnelle de l'oxydation du silicium: Analyse viscoélastique de la relaxation des contraintes", Thèse présentée à l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres-Artois, no. d'ordre 1449, Janvier 1995.
- [35] J. Kelma, R. Pyle and E. Domangue, "Reliability Implications of Nitrogen Conatmination during Deposition of Sputtered Aluminium/Silicon Metals Films", IEEE/IRPS Proceedings, p. 1, 1984.
- [36] P. A. Flinn, "Mechanical Stress in VLSI Interconnections; Origins, Effects, Measurement, and Modeling.", MRS Bulletin, pp. 70-73, Nov. 1995
- [37] H. Park, K.S. Jones, J.A. Slinkman and M.E. Law, "The Effect of Strain on Dopant Diffusion in Silicon," IEDM Tech. Dig., pp. 303-306, 1993.
- [38] K. Osada, S. Matsumoto, M. Yoshida and E. Arai, "Effect of Stress in the Deposited Silicon Nitride Films on Boron Diffusion in Silicon," in Proc. of the Third International Symposium on Process Physics and Modeling in Semiconductor Technology, The Electrochemical Soc, pp. 98-107, 1993.
- [39] S.T. Ahn, H.W. Kennel, J.D. Plummer and W.A. Tiller, "Film Stress-Related Vacancy Supersaturation in Silicon under Low-Pressure Chemical Vapor Deposited Silicon Nitride Films," J. Appl. Phys, vol. 64, n. 10, pp. 4914-4919, 15 November 1988.
- [40] G. Ghibaudo, "Modeling of Silicon Oxidation Based on Stress Relaxation", Philisophical Magazine B, vol. 55, n. 2, p147, February 1987.
- [41] A. Poncet, "Accurate Simulation of Mechanical Stresses in Silicon During Thermal Oxidation", Proceedings of SISDEP 1993, vol. 5, p. 173, September 1993.
- [42] J. Damiano et al., "Characterization and Elimination of Trench Dislocations", Proceedings of VLSI Symposium 1998, June 1998.
- [43] J.L Egley and D. Chidambarao, "Strain Effects on Device Characteristics: Implementation in Drift Diffusion Simulators", Solid-State Electronics, vol. 36, n. 12, pp 1653-1664, 1993.
- [44] K. Takeuchi and R. Newbury, Phys. Rev. B, vol. 43, p. 7324, 1991.
- [45] B. Baccus, D. Collard, P. Ferreira, V. Senez, E. Vandenbossche, "IMPACT-4 - version 4.8 User's Guide", July 1996.

# Chapitre 2

---

## *II- Origines des Contraintes Mécaniques*

*Les structures intégrées sont soumises, lors de leur fabrication, à de nombreux mécanismes générateurs de contraintes mécaniques. Toute charge, qu'elle soit d'origine mécanique, thermique ou chimique est susceptible de créer des contraintes.*

*Les contraintes thermiques, dues aux différences des coefficients de dilatation thermiques, sont les plus connues. Elles ne sont pas les seules, et ne sont souvent pas les plus critiques. La croissance chimique de films minces, par oxydation, est également une source de contraintes importantes. Les dépôts de couches fines, en situations hors d'équilibre, génèrent également des contraintes, dites intrinsèques, qui peuvent atteindre des niveaux très élevés. Les changements dans la composition chimique de matériaux, dûs par exemple à l'absorption/perte de radicaux OH (en ambiance humide), les réactions chimiques s'accompagnant de changement volumiques, les changements structurels tels que la cristallisation, l'amorphisation, sont autant de sources différentes de contraintes, appelées extrinsèques.*

*Tous ces mécanismes physiques sont susceptibles de modifier l'équilibre mécanique de la structure et doivent donc être pris en compte dans une modélisation mécanique complète.*

*Ce chapitre détaille l'ensemble de ces phénomènes physiques générateurs de contraintes mécaniques. Il résume les observations rapportées dans la littérature et établit les relations utiles à la modélisation.*

La fabrication de circuits micro-électroniques intégrés fait appel à un nombre important de séquences élémentaires: épitaxies, dépôts, gravures, oxydations, implantations, recuits thermiques. Ces différentes étapes sont toutes critiques du point de vue de la génération de contraintes mécaniques, puisqu'elles induisent des déséquilibres mécaniques.

Ainsi l'implantation d'impuretés (bore, phosphore, antimoine, arsenic), souvent plus gros que les atomes de silicium, donne lieu à des distensions de la maille cristalline dans le substrat et donc à des contraintes [1].

Il en est de même lors des dépôts de films fins: l'établissement des liaisons inter-atomiques entre le substrat et le film se fait au prix de modifications des distances inter-atomiques, et donc avec apparition de contraintes. Ces contraintes, appelées contraintes intrinsèques ( $\sigma_i$ ) sont fortement dépendantes des conditions expérimentales de dépôt. Une interprétation énergétique consiste à dire que le matériau déposé est instable, par rapport à une situation libre de tout lien avec le substrat.

Les différentes modifications de structure survenant dans les matériaux lors des cycles thermiques suivant leur dépôt, tels que les densifications, cristallisations, pertes ou absorptions des radicaux OH, contribuent également à des changements des liaisons atomiques film/substrat, à l'interface, et engendrent de nouvelles contraintes. Celles-ci sont appelées extrinsèques ( $\sigma_{ext}$ ).

L'oxydation de structures non planes de silicium, pour former de l'oxyde de silicium, notamment en vue d'isoler les zones actives du circuit, est elle aussi génératrice de contraintes. La croissance d'un oxyde à la surface du silicium provoque une déformation globale de la structure, c'est à dire de l'oxyde déjà existant et du substrat.

Les étapes de gravure sont elles aussi à prendre en compte. Elles génèrent des discontinuités sur les couches, ce qui par effets géométriques, donne lieu à des zones fortement contraintes aux bords. Très localisées, ces contraintes peuvent atteindre des amplitudes importantes, notamment en cisaillement, qui peuvent dépasser le seuil critique de formation de boucles de dislocation [2].

Finalement, les différentes étapes de fabrication mettent en oeuvre des températures élevées et des variations thermiques importantes. Une distribution non uniforme de température, au sein d'un matériau, crée localement des zones de dilatation ou de contraction, et donc des contraintes tensiles ou compressives. Les chocs thermiques qui peuvent survenir sur des structures multicouches, donnent lieu également à des contraintes importantes, de part la différence des coefficients de dilatation thermique de chaque matériau. Les conditions de fabrication propres aux procédés modernes ne font qu'accentuer ces phénomènes de génération de contraintes thermiques, en employant notamment des variétés de plus en plus grandes de matériaux, aux propriétés mécaniques différentes, et en mettant en jeu des variations thermiques de plus en plus brutales.

Les problèmes mécaniques deviennent donc critiques. Une démarche d'optimisation des procédés, consistant à proposer des règles élémentaires de fabrication permettant de réduire les effets des contraintes mécaniques, passe obligatoirement par une bonne compréhension des phénomènes générateurs de contraintes.

Une classification des sources des contraintes intervenant dans les procédés microélectroniques peut être obtenue en considérant les différentes interactions entre le substrat et les matériaux des couches successivement déposées. On arrive ainsi aux catégories de contraintes suivantes.

## II-1 Les Contraintes d'Origine Thermiques

La première source de contraintes que l'on doit envisager est la source thermique. Lorsque la température s'élève, les éléments des différents corps d'une structure se dilatent. De même lors des refroidissements, les corps se contractent. Or, ces dilatations ou contractions ne peuvent pas en général s'effectuer librement. Chaque élément de la structure est en effet susceptible de subir une déformation différente. Des contraintes prennent alors naissance au sein des matériaux. Elles résultent de l'équilibre mécanique qui s'établit dans la structure.

Considérons un exemple simple de structure, constituée uniquement d'un seul matériau. Face à une variation thermique,  $\Delta T$ , les éléments vont subir une déformation  $\varepsilon_{th}$ , qui sera fonction de la variation thermique ( $\Delta T$ ) et du coefficient de dilatation thermique du matériau ( $\alpha$ ):

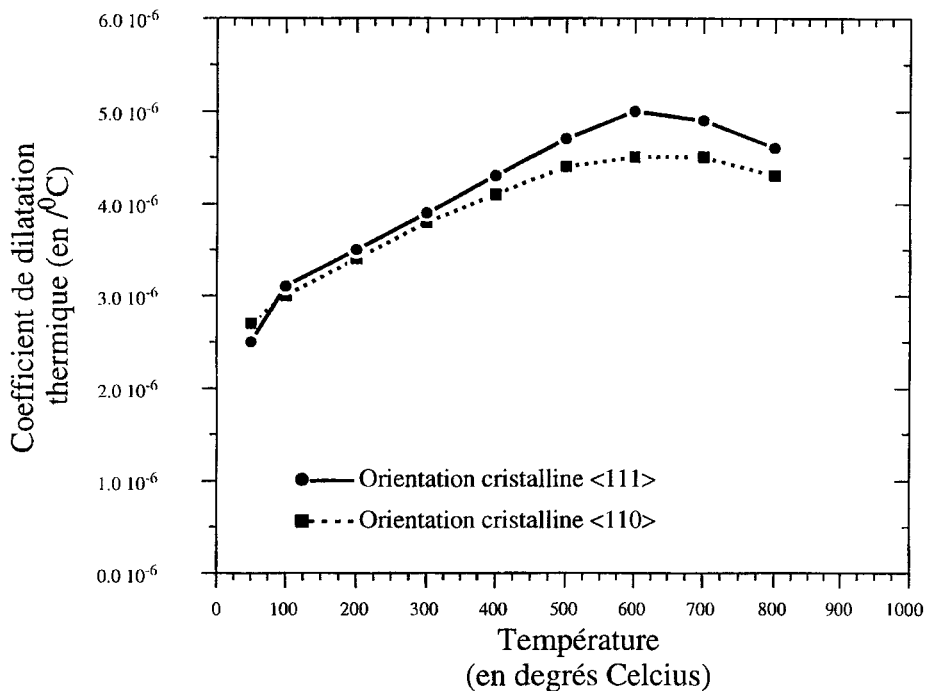
$$\varepsilon_{th} = \alpha \Delta T \quad (\text{II.1})$$

Le matériau se contractera si la variation thermique est négative (descente en température). Il se dilatera si celle-ci est positive (montée en température).

Le coefficient de dilatation thermique (CDT) est une caractéristique intrinsèque du matériau. Il dépend de la nature isotrope ou non du matériau, de l'orientation cristalline dans le cas de corps cristallin et est également fonction de la température.

Ainsi, dans le cas du silicium, Maissel a mesuré par une méthode optique la déformation d'échantillons de silicium, soumis à des variations thermiques, dans une gamme de températures allant de 50°C à 850°C, et en a déterminé la valeur du coefficient de dilatation thermique en fonction de la température [4]. Les valeurs obtenues sont comprises entre  $2.5 \cdot 10^{-6} / ^\circ\text{C}$  et  $5.0 \cdot 10^{-6} / ^\circ\text{C}$ . Ces mesures ont été menées pour les orientations cristallines  $\langle 111 \rangle$  et  $\langle 110 \rangle$ , ce qui lui a permis de déterminer des valeurs plus faibles suivant le plan  $\langle 110 \rangle$ . La figure II-1 donne l'évolution de ce coefficient pour le silicium, pour ces deux orientations.

D'autres auteurs ont étudié de la même manière l'évolution du coefficient de dilatation thermique du silicium polycristallin. Ainsi, Suzuki a par exemple obtenu des valeurs de ce coefficient comprises entre  $2.3 \cdot 10^{-6} / ^\circ\text{C}$  et  $4.2 \cdot 10^{-6} / ^\circ\text{C}$ , dans la gamme de températures 100°C - 900°C [5]. Ces résultats expérimentaux sont obtenus par des mesures de courbure de tranches de silicium sur lesquelles une couche de polysilicium avait été préalablement déposée. Les valeurs observées sont relativement proches de celles du silicium.



**Figure II-1:** Evolution du coefficient de dilatation thermique du silicium, pour les orientations cristallines <111> et <110> [4].

En ce qui concerne le coefficient de dilatation thermique des oxydes de silicium, de nombreux auteurs proposent dans la littérature des valeurs proches de  $0.5 \cdot 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ , bien que dans certains cas les mesures n'aient été réalisées que pour des températures comprises entre  $20^{\circ}\text{C}$  et  $400^{\circ}\text{C}$  [6] [7] [8]. Cette valeur est souvent considérée constante en fonction de la température. La dépendance du coefficient de dilatation thermique avec la température, dans le cas de l'oxyde, est en effet beaucoup plus faible que dans les cas du silicium monocristallin ou polycristallin, comme l'a montré Sinha [9]. Cet auteur a observé des valeurs ne variant qu'entre  $0.55 \cdot 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$  et  $1.5 \cdot 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ , dans une large gamme de températures. S'appuyant sur ces observations, la plupart des auteurs considèrent une dilatation thermique constante et égale à  $0.5 \cdot 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ , pour l'ensemble des oxydes, qu'ils soient thermiques, ou déposés par des méthodes de CVD [10] (Chemical Vapor Deposition) ou LPCVD (Low Pressure Chemical Vapor Deposition) [10], PECVD [11] [12], ou encore pour des oxydes formés à partir de composés TEOS (Tetraethylorthosilicate) [13] ou finalement dopés au bore et/ou phosphore (Boro-Phospho-Silicate Glass) BPSG [14].

Malgré l'observation d'une dépendance du coefficient de dilatation thermique en fonction de la température, ce paramètre est souvent pris constant, ce qui permet de mener des études de contraintes avec une approche analytique. Il en sera ainsi dans l'ensemble des simulations réalisées dans ce travail. Les valeurs des coefficients seront soit calibrés, soit directement extraites de la littérature, en négligeant les dépendances en température.

Dans une approche numérique, la prise en compte d'une dépendance par rapport à la température ou à l'orientation cristalline, dans le cas du silicium, ne constitue pas une difficulté. En effet, il suffit d'inclure, dans la base de donnée des propriétés des matériaux, la loi de variation des coefficients en fonction du paramètre donné, soit en introduisant une expression analytique soit directement en codant les différentes valeurs de ces coefficients. Les algorithmes de simulation sont établis de sorte que, à chaque étape du calcul, les propriétés mécaniques des matériaux sont déterminées d'après cette base de données. La difficulté réside dans le travail expérimental de mesure des propriétés et de calibration de ces lois de variation.

Considérons maintenant une structure, constituée d'un substrat sur lequel on a déposé un film mince. Ce bicouche va servir de test pour mettre en évidence les déformations thermiques. Il est représentatif des structures multicouches, plus complexes, que l'on sera amenés par la suite à étudier. Supposons une variation thermique,  $\Delta T$ , appliquée à la structure. Chaque matériau subira une déformation  $\varepsilon$ , comme précédemment. Ainsi, la déformation du film sera donnée par:

$$\varepsilon_{film} = \int_{T_0}^{T_1} (\alpha_{film} - \alpha_{substrat}) \Delta T \quad (II.2)$$

où  $\alpha_{substrat}$  et  $\alpha_{film}$  sont respectivement les coefficients de dilatation du substrat et du film.  $T_0$  et  $T_1$  sont respectivement les températures de départ et finale.

La résolution de cette expression se fait aisément en prenant comme hypothèse que les matériaux sont isotropes. Les coefficients  $\alpha_{substrat}$  et  $\alpha_{film}$  étant indépendants de la température, l'équation (II.2) devient:

$$\varepsilon_{film} = (\alpha_{film} - \alpha_{substrat})(T_1 - T_0) \quad (II.3)$$

La contrainte associée à cette déformation sera déterminée en considérant les lois de comportement rhéologique caractérisant les matériaux. Ainsi, si l'on suppose que les matériaux suivent une loi linéaire élastique, la contrainte qui apparaît dans le film sera donnée par la relation suivant [15]:

$$(\sigma_{th})_f = \frac{-E_f}{1 - \nu_f} (\alpha_{film} - \alpha_{substrat}) \Delta T (1 + \nu_f) \quad (II.4)$$

où  $\frac{E_f}{1 - \nu_f}$  est appelé module de rigidité élastique du film.  $E_f$  et  $\nu_f$  sont respectivement le module d'Young et le coefficient de Poisson du film.

Il est important de noter que cette expression est obtenue en supposant que l'épaisseur du film est négligeable devant celle du substrat. Ceci est toujours le cas dans les structures étudiées, puisque l'épaisseur des plaques de silicium sont typiquement de l'ordre de 0.5 mm à 0.6 mm [16] alors que les couches déposées sont de l'ordre de la centaine de nano-



mètres voire du micromètre. Cette hypothèse permet d'obtenir une expression de la contrainte indépendante des coefficients élastiques du substrat.

Dans un cas plus générale, où les matériaux sont régis par des comportements mécaniques plus complexes, comme c'est le cas pour la plupart des matériaux utilisés dans le domaine de la fabrication des circuits intégrés, l'expression de la contrainte thermique devient:

$$(\sigma_{th})_f = [D]_f(\alpha_{film} - \alpha_{substrat})\Delta T \quad (II.5)$$

où  $[D]_f$  est la matrice de rigidité du matériau, caractérisant son comportement rhéologique. Cette matrice relie le tenseur des contraintes à celui des déformations. Une expression générale de cette matrice nécessite d'établir ces neuf coefficients caractéristiques. Cependant, dans l'étude que nous menons, l'hypothèse des déformations planes permet de simplifier son expression.

Cette hypothèse est justifiée dans nos études puisque, d'une part, la dimension z, perpendiculaire au plan de simulation, est très grande devant les autres dimensions, et que d'autre part, les sollicitations sont constantes suivant cet axe.

## II-2 Les Contraintes Intrinsèques

Les contraintes intrinsèques sont également une source de contraintes importantes. Moins facilement perceptibles, elles sont néanmoins très critiques, et peuvent engendrer des phénomènes de courbure de plaques, de craquements ou de déchirures de films.

Expérimentalement, ces contraintes peuvent être mises en évidence à partir d'observations de phénomènes de courbure lors de dépôt de couches épaisses sur un substrat de silicium cristallin. Ces courbures sont dues à des contraintes très élevées, qui, bien que également d'origine thermiques, sont essentiellement intrinsèques et générées lors du dépôt.

Ainsi, Suzuki a mesuré le rayon de courbure dû à la croissance d'une couche de polysilicium d'épaisseur variable comprise entre 100  $\mu\text{m}$  et 500  $\mu\text{m}$ , sur des structures multicouches composées d'un substrat de silicium cristallin (d'épaisseur 300  $\mu\text{m}$ ) recouvert d'un film d'oxyde de silicium (d'épaisseur 1.7  $\mu\text{m}$ ) [5]. Une concavité de la structure est observée dans le sens de la croissance du polysilicium, avec des rayons de courbure fonction de l'épaisseur de la couche et de la température de dépôt. Cette courbure ne peut pas être attribuée à la composante thermique de la contrainte puisque les coefficients de dilatation thermique du polysilicium et du silicium sont relativement proches. Elle est donc expliquée par des phénomènes internes à la couche qui donnent naissance à des contraintes intrinsèques. Cette hypothèse a été confirmée par d'autres études qui ont montré que l'adjonction d'oxygène lors de la phase de dépôt affecte le phénomène de courbure [17]: le fait de doper légèrement la couche déposée avec des atomes d'oxygène, permet de réduire la courbure des films laissant supposer une compensation des contraintes dans le polysilicium [18].

Des observations similaires ont été faites sur le nitrure de silicium. Généralement utilisé comme masque dans les étapes d'oxydation, le nitrure de silicium est un matériau stable, qui présente malheureusement des contraintes intrinsèques importantes. Des valeurs tensiles extrêmement importantes, de l'ordre de 1GPa, sont couramment mesurées après la formation des couches de nitrure [1] [19]. Ces contraintes tiennent compte de la composante thermique mais sont essentiellement dûes à la partie intrinsèque qui apparaît au moment du dépôt. Les méthodes mises au point pour réduire ces contraintes résiduelles, sont basées sur le contrôle des paramètres de dépôt: température, pression, ambiance. De la même manière, certaines techniques utilisant l'implantation d'impuretés (Bore ou Phosphore), après la phase de dépôt permettent de compenser les contraintes intrinsèques tensiles, et d'obtenir des films plus faiblement contraints [19], [20].

Un dernier exemple mettant en évidence les contraintes intrinsèques dans les films déposés peut être tiré des mesures expérimentales réalisées par Bhushan, sur des films d'oxyde de silicium [21]. Cet auteur a procédé à des mesures directes des contraintes dans les films, juste après le dépôt et pendant la descente en température suivant le dépôt. Des films déposés par des techniques dite APCVD (Atmospheric pressures chemical vapor deposition) et PECVD (Plasma enhanced chemical vapor deposition) ont été étudiés. La mesure "in-situ" des contraintes en fonction de la température permet de directement avoir accès à la composante intrinsèque. En effet, à température de dépôt, aucune variation thermique n'ayant encore eu lieu, la contrainte résiduelle correspond entièrement à la partie intrinsèque. Les valeurs observées dépendent nettement du procédé de fabrication et sont de l'ordre de 10MPa (oxydes APCVD) à 70 MPa (oxyde PECVD).

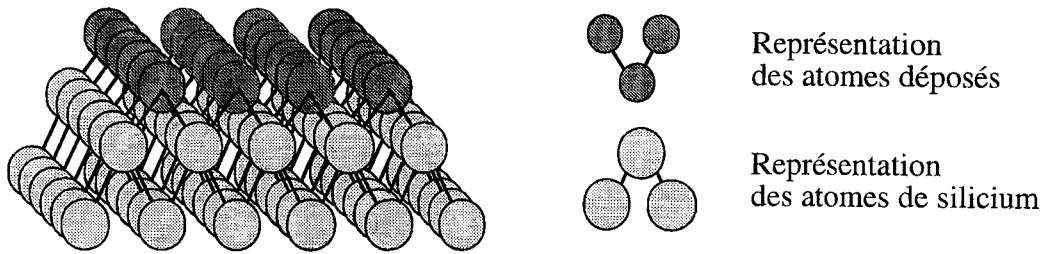
L'ensemble de ces observations permet de mettre en évidence l'importance de la composante intrinsèque dans le champs de contraintes résiduelles [22]. Ces contraintes sont fondamentalement dépendantes du procédé de fabrication du film, c'est à dire:

- 1 de la température de dépôt,
- 2 de la pression,
- 3 des concentrations des agents chimiques réactifs,
- 4 de la vitesse de dépôt,
- 5 de la présence d'impuretés ioniques (bore, phosphore),
- 6 de la présence de radicaux atomiques OH (ambiance humide),
- 7 du type de réacteur,
- 8 de l'épaisseur de la couche formée.

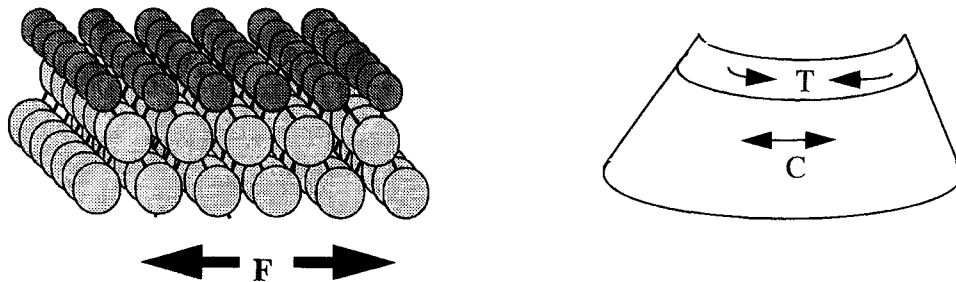
Cette large dépendance de la valeur de la contrainte au procédé rend difficile la modélisation du phénomène.

Les contraintes intrinsèques apparaissent généralement parce que les liaisons interatomiques entre le matériau déposé et le substrat sur lequel il est déposé sont dans un état énergétique instable. Au moment du dépôt, un équilibre mécanique s'établit en tenant compte des distances interatomiques respectives du film et du substrat. Dans le cas d'un dépôt sur silicium, si l'équilibre se fait avec un élargissement de la maille cristalline du silicium, des contraintes tensiles apparaîtront dans le substrat. Ces contraintes vont tendre à contracter de nouveau la maille cristalline, vers une état d'équilibre plus proche de celui avant le dépôt. Le film quant à lui sera en compression. Inversement, le substrat sera en compression si la distance interatomique du film déposé est plus faible que celle du silicium [23]. Le schéma sui-

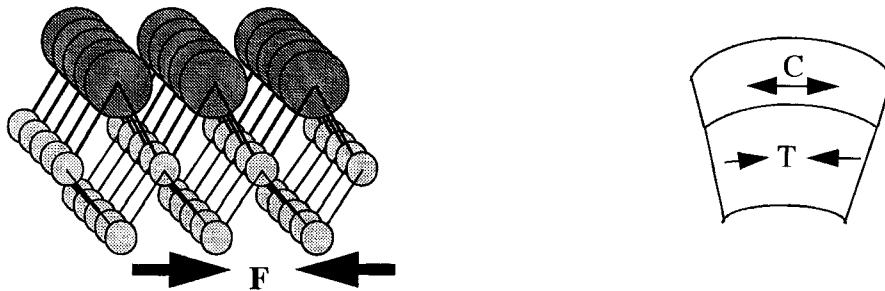
vant (Figure II-2:) résume ces deux cas.



Situation en équilibre énergétique: les dimensions de la maille de silicium sont conservées.



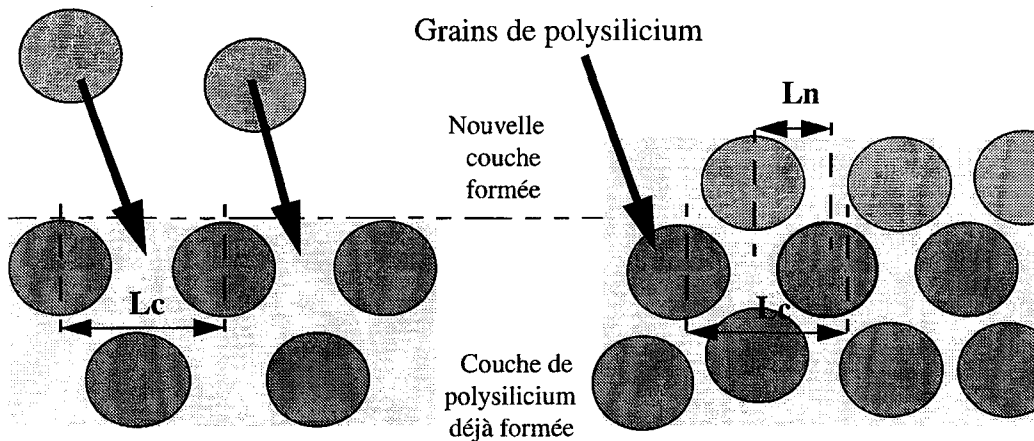
Situation hors équilibre générateur de contraintes compressives: Les atomes sont plus proches les uns des autres que dans le cas stable.



Situation hors équilibre générateur de contraintes tensiles: Les atomes sont éloignés les uns des autres par rapport au cas stable.

**Figure II-2:** Représentation schématique des mécanismes générateurs de contraintes intrinsèques (représentées ici par F) lors d'un dépôt sur du silicium cristallin [23].

De la même manière, dans le cas de dépôt de polysilicium, une explication du phénomène de contraction de la couche déposée peut être proposée en considérant la distance entre les centres des grains de polysilicium voisins (Figure II-3:). L'établissement de nouvelles liaisons entre grains de polysilicium, dû à l'apport de nouvelle matière à la surface du matériau déjà formé, provoque une diminution de la distance caractéristique inter-grain, et donc l'apparition de contraintes tensiles. La courbure des plaques de silicium est alors justifiée par ces contraintes tensiles dans le polysilicium.



**Figure II-3:** Représentation schématique des mécanismes de “sintering” permettant d’expliquer l’apparition de contraintes intrinsèques tensiles dans une couche de polysilicium [5].

### II-3 Les Contraintes dues aux Gravures

Les étapes de gravure sont généralement des étapes critiques en termes de contraintes mécaniques puisqu’elles induisent des pics de contraintes élevés, susceptibles de générer des boucles de dislocations dans le silicium. Les autres sources de contraintes, qu’elles soient thermiques ou intrinsèques génèrent des niveaux de contraintes uniformes sur des structures multicouches continues. Or, dans le silicium, ces contraintes sont relativement faibles compte tenu de l’épaisseur du substrat, par rapport aux épaisseurs des films déposés. Ce sont justement les étapes qui amènent des discontinuités dans la structure qui vont produire des zones fortement contraintes aux abords des coins formés.

Ces niveaux élevés de contrainte peuvent avoir des conséquences critiques pour la suite du procédé, en favorisant notamment la formation de boucles de dislocations. Ainsi, des contraintes de cisaillement élevées vont pouvoir être à l’origine de dislocations par glissement des plans cristallins. De même, dans les zones fragilisées par la sur-concentration de lacunes ou d’interstitiels (dûs notamment à des implantations ioniques), des contraintes normales élevées (tensiles ou compressives) vont pouvoir induire des boucles de dislocations par nucléation des interstitiels en défauts étendus.

Considérons une structure constituée d’un film fin d’épaisseur  $h$ , déposé sur un substrat infiniment épais par rapport au film. Le film possède une précontrainte ( $\sigma_0$ ) uniforme dans les directions  $x$  et  $y$ . Supposons maintenant que la couche fine soit gravée sur la moitié de la structure. Le substrat va alors se déformer de façon asymétrique: la partie libérée peut se déformer, pour retrouver la situation qui était la sienne avant le dépôt, alors que le côté restant sous la couche évolue peu. La déformation asymétrique du silicium se traduit par une force

interne dans le substrat, et donne donc naissance à des contraintes. Il est possible d'établir pour des cas simples, une expression analytique des composantes du tenseur de contraintes dans le silicium. Hu a ainsi déterminé l'expression de ces contraintes dans plusieurs cas de figure [1][2]. La modélisation par éléments finis permet quant à elle de calculer numériquement les forces en présence dans le cas général, et d'en déduire les composantes de la contrainte dans le silicium.

Les effets géométriques induits par la gravure d'une couche s'accompagnent donc de l'apparition de contraintes élevées dans le substrat, localisées aux bords des motifs, et doivent par conséquent être traitées comme une source de contraintes à part entière.

#### II-4 Les Contraintes dûes aux Oxydations non Planes

La réalisation de structures d'isolation, que ce soit de type LOCOS, LOCOS enterré ou tranchée, nécessite l'oxydation longue du silicium, pour former l'oxyde de silicium épais, isolant. Dans ces oxydations, l'expansion volumique résultant de la transformation du silicium en oxyde de silicium, ne se fait pas librement, compte tenu de la forme non plane de la structure, et s'accompagne donc de l'apparition de contraintes mécaniques dans le substrat et dans l'oxyde. De plus la présence d'autres matériaux, tels que le nitrure, empêche également la croissance sans contrainte de l'oxyde.

Ces niveaux de contraintes ont rapidement posé des problèmes de fiabilité dans les procédés de fabrication. Historiquement, dès les années 70, les technologues ont observé une augmentation critique des défauts dans le silicium, lorsque la température d'oxydation est réduite [24]. Cette dégradation est attribuée à une plus faible relaxation des contraintes dans l'oxyde de silicium. L'augmentation de la densité de défauts est particulièrement sensible lorsque la température d'oxydation passe en dessous de 975°C. Cette température correspond au niveau en dessous duquel la viscosité de l'oxyde de silicium augmente fortement, empêchant ainsi toute relaxation des contraintes.

De nombreuses recherches ont donc été engagées afin de bien comprendre les mécanismes de génération des contraintes mécaniques au cours de l'oxydation du silicium, ainsi que les phénomènes de relaxation. Ces recherches ont constitué les premiers travaux de modélisation des contraintes mécaniques dans les structures intégrées.

Dans l'oxydation thermique, un volume de silicium est transformé en 2.25 volumes d'oxyde de silicium. Cette croissance se fait dans les trois directions spatiales. Verticalement, elle se fait librement alors que latéralement elle est retenue par la présence du substrat. L'expansion volumique de l'oxydation crée un champ de déplacements aux interfaces oxydées, qui déforme les couches de l'oxyde déjà formé ainsi que les couches déposées au dessus de la structure: film de polysilicium, masque de nitrure. Le champs de déplacement imposé à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> est obtenu suivant les relations suivantes [25][26][27]:

$$\text{Déplacement initial de la surface du silicium} \quad \alpha \cdot V_{ox} \cdot \Delta t \quad (\text{II.6})$$

$$\text{Déplacement initial de l'oxyde :} \quad (1 - \alpha) \cdot V_{ox} \cdot \Delta t \quad (\text{II.7})$$

où  $V_{ox}$  est la vitesse d'oxydation le long de l'interface Si/SiO<sub>2</sub>, calculée par rapport au flux d'oxydants absorbés (G) et au nombre d'atomes nécessaires à la formation d'un volume unitaire d'oxyde ( $N_1$ ).

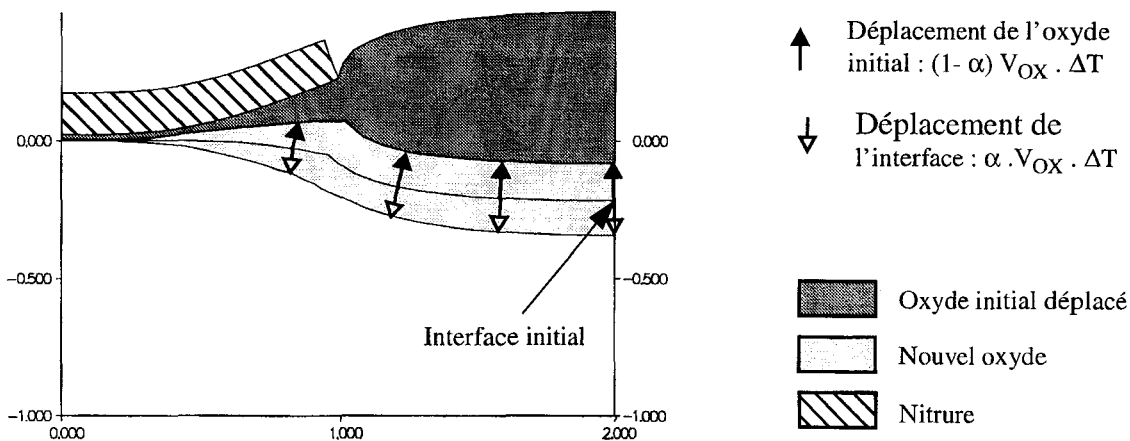
$$|V_{ox}| = \frac{k_{si} \cdot C_{ox}}{N_1} \quad (II.8)$$

Le flux (G) aux interfaces oxydés est proportionnel à la constante de réaction ( $k_{si}$ ) et correspond à l'absorption d'oxydants par la réaction d'oxydation:

$$D_{ox} \nabla C_{ox} \cdot \vec{n}_0 = -k_{si} \cdot C_{ox} \quad (II.9)$$

$C_{ox}$ ,  $\vec{n}_0$  et  $D_{ox}$  sont respectivement la concentration des agents oxydants à l'interface, le vecteur normal à l'interface et le coefficient de diffusion des agents oxydants.

La figure II-4 illustre le mécanisme d'oxydation montrant la déformation de la structure sur un pas élémentaire d'oxydation, due à la croissance du nouvel oxyde [28].



**Figure II-4:** Schéma illustrant les mécanismes intervenant dans une oxydation 2D.

Les contraintes mécaniques générées par les déformations successives de l'oxyde sont alors déterminées suivant les lois mécaniques régissant les matériaux présents (lois élasto-plastiques, visco-élastiques), qui permettent d'écrire les relations contraintes/déformations adéquates.

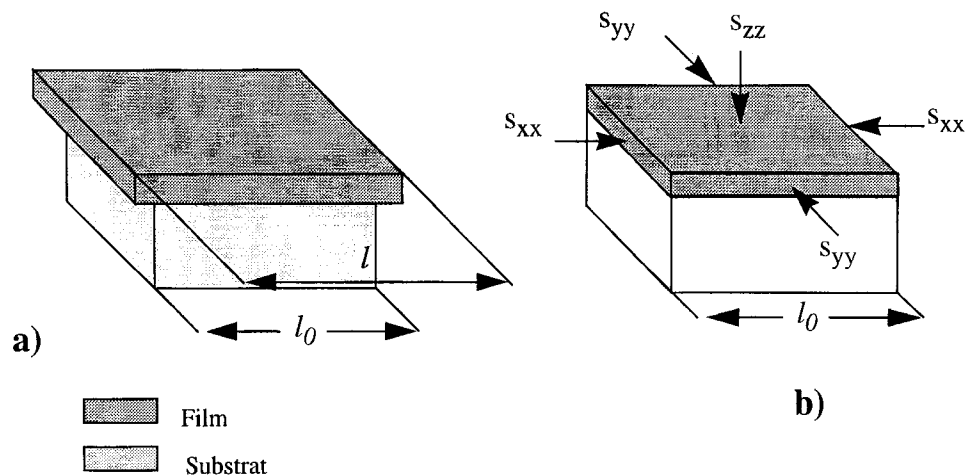
Ces contraintes ont un impact considérable sur la cinétique d'oxydation. Comme l'ont démontré Kao et al [29], la diffusivité des agents oxydants,  $D_{ox}$ , et la constante

de réaction ( $k_{sj}$ ) sont directement dépendantes des niveaux de contraintes résiduelles, et réduites lorsque celles-ci sont compressives.

Enfin il faut savoir que le même type de contraintes doit être pris en compte lors de la formation de siliciures.

## II-5 Les Contraintes Extrinsèques

Les contraintes extrinsèques sont dues à des changements structurels dans les matériaux qui donnent lieu à des changements volumiques ou de forme [23]. La plupart des films subissent des phénomènes de densification après leur formation, tout particulièrement au cours des premiers cycles thermiques suivant le dépôt. De même, certains matériaux, tels que le polysilicium, au départ en phase amorphe, peuvent subir des phénomènes de cristallisation, qui s'accompagnent de déformations géométriques, souvent de contraction, et entraînent l'apparition de contraintes tensiles [30][31]. On observe également des changements dans la structure des matériaux dus à l'absorption ou au rejet de molécules d'eau. Ces phénomènes sont notamment vérifiés dans la plupart des oxydes déposés, qui souvent absorbent ou rejettent des molécules OH (humidité), dans le milieu ambiant, lors des différents cycles thermiques [32]: un oxyde riche en radicaux OH, va perdre ses molécules d'eau pendant la phase de montée en température. Ces modifications de structure s'accompagnent d'une augmentation et/ou d'une diminution des niveaux de contraintes dans le film. Il s'agit de phénomènes non linéaires. Ces matériaux possèdent une caractéristique "Contrainte en fonction de la Température" présentant une forte hystérésis.



**Figure II-5:** Schéma du bicouche étudié: a) le film est libre de se dilater de  $l_0$  à  $l$ , b) le film est lié au substrat et ne peut donc pas se dilater librement. Sa dimension longitudinale reste  $l_0$ , et est par conséquent soumis à des contraintes compressives.

Quand un film absorbe des radicaux OH, il tend à se dilater et à augmenter de

volume. Cependant, ce changement volumique ne peut se faire librement suivant toutes les directions. Les dimensions latérales dans le plan du film ne peuvent changer puisque la couche est solidaire du substrat, qui ne subit pas de modifications. De cette impossibilité de se dilater suivant les directions du plan, les contraintes dans le film vont augmenter et devenir plus compressives. Pour déterminer l'évolution du champs de contraintes, considérons un film fin totalement libre suivant les trois directions (x,y,z). L'absorption de molécules d'eau entraîne une augmentation du volume du film  $\Delta V$ . La déformation dans chaque direction x,y et z est  $1/3\Delta V/V$ . Ainsi suivant la direction x par exemple, on peut écrire:

$$\frac{1}{3} \frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{xx} = \frac{(l_0 - l)}{l} \quad (\text{II.10})$$

où  $l_0$  et  $l$  sont respectivement les longueurs initiales et finales du film, suivant x. La figure II-5 illustre l'exemple traité.

Si l'on suppose pour simplifier que les matériaux possèdent un comportement élastique linéaire, les relations entre déformations et contraintes, dans le cas d'un état plan de contraintes sont données par les trois équations suivantes:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \frac{1}{E} \{ \sigma_{xx} - \nu \sigma_{yy} \} \\ \varepsilon_{yy} &= \frac{1}{E} \{ \sigma_{yy} - \nu \sigma_{xx} \} \\ \varepsilon_{xy} &= \frac{1}{G} \sigma_{xy} \end{aligned} \quad (\text{II.11})$$

où E est le module de Young exprimé généralement en  $\text{N/mm}^2$  ou en  $\text{dynes/cm}^2$ ,  $\nu$  est le coefficient de Poisson et G le module d'élasticité transversale encore appelé module de glissement. G est proportionnel à E et est également exprimé en  $\text{N/mm}^2$  ou en  $\text{dynes/cm}^2$ .

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (\text{II.12})$$

Les expressions II.11 permettent d'obtenir dans le cas simple du bicouche l'expression des contraintes biaxiales présentes dans la couche, qui correspondent aux contraintes nécessaires à comprimer le film de nouveau vers sa dimension de départ  $l_0$ .

$$\sigma_{xx} = \frac{E}{(1 - \nu^2)} (\varepsilon_{xx} + \nu \cdot \varepsilon_{yy}) \quad (\text{II.13})$$

soit:

$$\sigma = \frac{1}{3} \frac{E}{(1 - \nu)} \frac{\Delta V}{V} \quad (\text{II.14})$$

Les phénomènes donnant lieu à l'apparition de contraintes extrinsèques sont importants et modifient considérablement la répartition des champs de contraintes dans les films et donc dans le substrat. Cette composante de contraintes est proportionnelle au changement volumique libre provoqué par la modification structurelle dans le film. Un calcul de ces contraintes requiert donc de calibrer les changements volumiques pouvant se produire.



## II-6 Les Contraintes dûes aux Implantations et aux Hétéroépitaxies

Un corps tel que le silicium peut contenir des régions de structure cristalline identique mais présentant des constantes de maille différentes. Les éléments de ces régions occupent alors un volume différent de celui des autres éléments du matériau. Les mailles entre éléments voisins vont donc devoir s'adapter au prix de déformations internes. L'énergie de déformation est directement proportionnelle à la variation volumique nécessaire à l'adaptation des mailles, et est d'autant plus importante que ces zones particulières sont incluses dans le matériau.

De façon générale, ces déformations localisées des mailles cristallines au sein d'un corps cristallin sont susceptibles de se produire lors de l'incorporation d'atomes de taille différentes de celles des atomes du matériau hôte. C'est ce qui peut se produire par exemple pendant les étapes d'épitaxie qui font intervenir des matériaux différents du substrat. On parle alors d'hétéroépitaxie. C'est ce qui peut se produire également lors des implantations ioniques à forte concentration: au dessus d'une certaine concentration, les distances de maille du substrat diminuent ou augmentent avec la concentration des atomes incorporés, suivant l'expression:

$$\frac{\Delta a}{a} = \beta C \quad (\text{II.15})$$

où  $a$  est la constante de maille du substrat,  $C$  la concentration en atomes de l'espèce implantée, et  $\beta$  le coefficient de contraction ou d'expansion de la maille.  $\beta$  est donné dans le tableau suivant pour quelques espèces atomiques [1][2].

Espèce	$\beta$ (cm <sup>3</sup> /atom)
Bore	entre $-4.5 \cdot 10^{-24}$ et $-5.6 \cdot 10^{-24}$
Phosphore	$-1.8 \cdot 10^{-24}$
Arsenic	$0.17 \cdot 10^{-24}$

Table II-1: Tableau des coefficients de contraction et/ou d'expansion des distances de maille. Les valeurs négatives indiquent une contraction.

Ce dernier phénomène a été décrit par Vegard en 1921 [33] et a été largement repris dans la littérature. Hu en propose une synthèse dans un article [1], en faisant référence aux différents travaux théoriques et expérimentaux sur le sujet.

Une fois connues et modélisées, les différents phénomènes générateurs de contraintes mécaniques vont être codés dans le simulateur de procédés technologiques pour circuits intégrés. L'ultime étape consistera ensuite à calibrer ces modèles. Nous aurons donc besoin de mesures expérimentales des contraintes mécaniques. Il existe différentes techniques : courbures de plaques [34], spectroscopie micro-Raman [35], CBED [36].

Nous présenterons dans la section suivante la méthode la plus couramment utilisée: la mesure des courbures de tranches.

## ***II-7 Méthode de Détermination des Contraintes par Mesure de la Courbure des Tranches de Silicium***

Les méthodes conventionnelles pour déterminer les contraintes mécaniques dans un matériau sont difficilement applicables dans le domaine de la microélectronique. La plupart des essais (essais de traction, de compression, de fluage) demandent en effet de disposer d'échantillons relativement grands. Or, un matériau possède une structure et des propriétés mécaniques différentes, selon qu'il est déposé en film fin ou en couche épaisse. Les caractéristiques rhéologiques volumiques des matériaux ne peuvent pas être directement appliquées dans notre étude. De plus, le comportement du matériau à étudier est également différent selon qu'il est solidaire d'un substrat, composé d'un matériau différent, ou isolé. Ainsi, en général, qu'elles soient théoriques ou expérimentales, les études mécaniques des matériaux en couche mince doivent tenir compte de la combinaison film/substrat, telle qu'elle est formée par le procédé de fabrication.

La plupart des méthodes expérimentales mises au point pour déterminer les contraintes mécaniques dans un film sont basées sur la mesure de la courbure de plaques de silicium, sur lesquelles le film a été déposé uniformément. La mesure de la courbure est réalisée en observant la réflexion sur la surface de l'échantillon, d'un rayon lumineux, d'un rayon X ou encore d'un rayon laser. L'angle entre le rayon incident et le rayon réfléchi est directement lié à l'inverse du rayon de courbure de la plaque. Ces techniques optiques de mesures de contraintes sont largement utilisées, la méthode utilisant un rayon laser présentant une meilleure résolution et une plus grande facilité d'utilisation que les autres méthodes.

A partir de la mesure du rayon de courbure d'une plaque, on détermine le niveau de contrainte uniforme dans le film déposé. Le film est supposé pour cela d'épaisseur égale à  $t_f$ , très petite devant celle du substrat,  $t_s$ . Si le système est soumis à une des charges extérieures présentées précédemment, la couche subira une déformation ( $\Delta\epsilon$ ). Un équilibre mécanique entre le film ainsi déformé et le substrat va s'établir afin de minimiser l'énergie totale du sys-

tème. Cet équilibre va provoquer également une déformation dans le substrat, comme représenté dans la figure II-6. La contrainte induite par la formation de la couche mince peut alors être calculée en mesurant le rayon de courbure de la plaque avant ( $R_0$ ) et après dépôt ( $R_1$ ) [37].

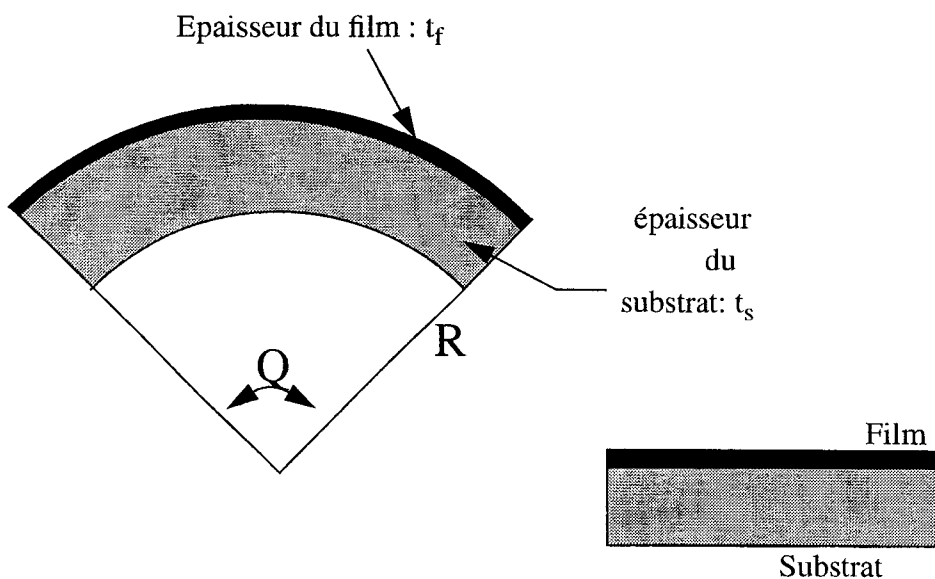
La contrainte est liée à la variation  $\Delta R=R_0-R_1$  suivant l'expression:

$$\sigma_f = \frac{1}{6} \cdot \frac{E_s}{1 - \nu_s} \cdot \frac{1}{R} \cdot \frac{t_s^2}{t_f} \quad (\text{II.16})$$

où  $E_s$  et  $\nu_s$  sont respectivement le module d'Young et le coefficient de Poisson du film.

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{R_1} - \frac{1}{R_0} \quad (\text{II.17})$$

Il est intéressant de noter que les coefficients élastiques du film n'interviennent pas dans l'équation II.16. A condition que celui-ci soit uniforme et qu'elle que soit sa structure, il est possible de déterminer sa contrainte résiduelle, en connaissant uniquement son épaisseur ainsi que l'épaisseur et les propriétés mécaniques du substrat.



**Figure II-6:** Déformation d'une structure bicouche due à une charge extérieure. La mesure de la courbure de la plaque ( $R$ ) avant et après la charge permet de calculer la contrainte induite dans le film. Le film est supposé très fin par rapport au substrat.



## Références Bibliographiques du Chapitre 2

- [1] S. M. Hu, "Stress-Related Problems in Silicon Technology", J. Appl. Phys., vol. 70, n. 6, pp. R53-R80, Septembre 1991.
- [2] B. Leroy, Dislocation 93, Solid State Phenomena., vol. 55-36, pp. 266-269, 1993.
- [3] S. M. Hu, "Film-Edge-Induced Stress in Substrates", J. Appl. Phys., vol. 50, n. 7, July 1979.
- [4] L. Maissel, "Thermal Expansion Of Silicon", J. Appl. Phys., vol. 32, p. 211, 1960.
- [5] T. Suzuki, A. Mimura and T. Ogawa, "The deformation of Polycrystalline-Silicon Deposited on Oxide-Covered Single Crystal Silicon Substrates", J. of Electrochem. Soc., vol. 124, n. 11, pp 1776-1780, Nov. 1977.
- [6] Corning Glass Works, Fused Silica, 7940 Data Sheets, Corning, New-York, 1978.
- [7] S. R. Stiffer and A. O. Cifuentes, "The Effect of Trench Corner Shapes on Local Stress Fields: A Three-Dimensional Finite-Element Modeling Study", IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 40, n. 3, pp. 557-563, March 1993.
- [8] O. V. Mazurin, M. J. Streltsina and T.P. Shaiko-Shaikovskaya, Handbook of Glass Data, Editions Elsevier Amsterdam, pp. 31-44, 1983.
- [9] A. K. Sinha, H. J. Levinstein and T. E. Smith, J. Appl. Phys., vol. 49, p. 2423, 1978.
- [10] M. Stadtmuller, "Mechanical Stress of CVD-Dielectrics", Journ. Electrochem. Soc, vol. 139, n. 12, pp. 3669-3674, December 1992.
- [11] D. Temple, A. Reisman, G. G. Fountain, M. Walters and S.V. Hattangady, "Mechanical Stress in SiO<sub>2</sub> Films Obtained by Remote Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition", Journ. Electrochem. Soc, vol. 140, n. 2, pp. 564-567, February 1993.
- [12] P. Ambrée, F. Keller, R. Wolf and K. Wandel, "Determination of the Mechanical Stress in Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposited SiO<sub>2</sub> and SiN layers.", Journal of Vacuum Science and Technology, B. vol. 11, n. 3, pp. 614-617, May/June 1993.
- [13] Ramkumar and A.N. Saxena, "Stress in SiO<sub>2</sub> Films Deposited by Plasma and Ozone Tetraethylorthosilicate Chemical Vapor Deposition Processes", Journal of Electrochemical Society, vol. 139, n. 5 pp. 1437-1442, May 1995.
- [14] G. Smolinsky and T.P. H. F. Wendling, "Measurements of Temperature Dependant Stress of Silicon Oxide Films Prepared by a Variety of CVD Methods", Journal of Electrochemical Society, Solid-State Science and technology, vol. 132, n. 4, pp. 950-954, April 1985.
- [15] O.C. Zienkiewicz, «The Finite Element Method in Engineering Science», Mc Graw Hill Eds. Chapitre 4, p52, 1971.
- [16] S.M. Sze, "VLSI Technology", Chapitre 1, p.36, Ed. MacGraw-Hill, Second Edition, 1988.

- [17] T.I. Kamins, J. of Electrochem. Soc., vol. 121, p. 681, 1974.
- [18] Y. Sumitomo, K. Niwa, H. Sawazaki and K. Sakai, "Semiconductor Silicon 1973," H. R. Huff and R. R. Burgess Editors, p. 893, The Electrochemical Society Softbound Symposium Series, Princeton, N. J. , 1973.
- [19] D. Qingyun, Z. Liankui, C. Mangzhen and Junru, "Ion Implant Compensation of Tensile Stress in Thick Silicon Nitride Films for X-Ray Masks", J. Vac. Sci. Technol. B7 (6), Nov/Dec 1989.
- [20] O. Tabata, S. Sugiyama and M. Takigawa, "Control of Internal Stress and Young's Modulus of Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> and Polycrystalline Silicon Thin Films using the Ion Implantation Technique", Appl. Physics Letter, vol. 56, pp. 1314-1316, April 1990.
- [21] B. Bhushan, S.P. Murarka and J. Gerlach "Stress in Silicon Dioxide Films Deposited using Chemical Vapor Deposition Techniques and the Effect of Annealing on these Stresses". J. Vac. Science and Technology, B-8, (5), Sept/Oct 1990.
- [22] P. Leduc, "Etudes des Contraintes Mécaniques dans les Edifices d'Interconnexions d'un Procédé Submicronique", Thèse présentée à l'Université des Sciences et Technologies de Lille Flandres-Artois, Février 1999.
- [23] S. B. Desu, "Influence of Stresses on the Properties of Ferroelectric BaTiO<sub>3</sub> thin Films", J. Electrochem. Soc. vol. 140, n. 10, October 1993.
- [24] A. E. Cosand and S. Prussin, Electrochemical Society Meeting, Washington D.C. Extended Abstract, n. 109, p. 292, May 1976.
- [25] V. Senez , D.Collard, B. Baccus, M. Brault and J. Lebailly, "Quantitative 2D Simulation of Silicon Oxidation with Visco-elastic Behaviour", J. Applied Phys., vol. 76, n. 6, pp. 3285-3296, Sept. 94.
- [26] V. Senez , D.Collard, P. Ferreira and B. Baccus, "Simulation of Advanced Field Oxidation using Calibrated Viscoelastic Stress Analysis", IEDM 94 Tech. Dig., pp. 881-884, San Francisco 1994.
- [27] V. Senez, "Modélisation Bidimensionnelle de l'Oxydation du Silicium: Analyse Visco-élastique de la Relaxation des Contraintes.", Thèse présentée à l'Université des Sciences et Technologies de Lille Flandres-Artois, Janvier 1995.
- [28] D. Collard, "Contribution à la Simulation de Technologies et de Dispositifs Silicium", Mémoire d'Habilitation à Diriger des Recherches présenté à l'Université des Sciences et Technologies de Lille Flandres-Artois, Décembre 1994.
- [29] D. B. Kao, J.P. Mc Vitties, W.D. Nix and K.C. Saraswat, "Two-Dimensional Thermal Oxidation of Silicon - 2. Modeling Stress Effects in Wet Oxides" IEEE Trans. Elec. Dev., vol. ED-35, pp. 25-37, 1988.
- [30] H. Miura, N. Saito, N. Okamoto, "Mechanical Stress Simulation During Gate Formation

of MOS Devices Considering Crystallization-Induced Stress of p-Doped Silicon Thin Films”, Proceedings of SISDEP Conference 1993, pp. 177-180, vol. 5, September 1993.

[31] H. Miura, H. Ohta, N. Okamoto, “Crystallization-induced Stress in Silicon Thin Films”, Applied Physics Letter, Vol. 60, No 22, pp. 2746-2748, June 1992.

[32] I. Blech and U. Cohen, “Effects of Humidity on Stress in Thin Silicon Dioxide Films”, J. Appl. Phys., vol. 53 , n. 6, pp. 4202-4207, June 1992.

[33] L. Vegard, Z. Phys. vol. 5, n. 17, 1921

[34] P. Singer, “Film Stress and How to Measure it”, Semiconductor International, p. 54, October 1995.

[35] H. Loechelt, G. Cave and J. Menendez, “Measuring the Tencor Nature of Stress in Silicon using Polarized off-axis Raman Spectroscopy”, Appl. Phys. Lett., vol. 66, n. 26, p. 3639, 1995.

[36] A Tixier, “Etude et Caractérisation de Structures d'Isolation de type LOCOS pour une Technologie 0.35 microns”, Thèse présentée à l'Université des Sciences et Technologies de Lille Flandres-Artois, Juin 1998.

[37] G. Stoney, “The Tension of Metallic Films Deposited by Electrolysis”, Proc. R. London Ser. A, vol. 82, p. 172, 1909.

# Chapitre 3

---

## *III-Notions de Base de la Mécanique des Matériaux*

*Ce chapitre rappelle les bases théoriques de la mécanique des matériaux continus. Il établit les relations générales d'équilibre d'un corps solide. Ces relations permettent de déterminer les efforts intérieurs engendrés dans le matériau soumis aux sollicitations extérieures décrites dans le chapitre précédent. Elles permettent également de calculer les déformations qui en résultent.*

*L'étude des contraintes mécaniques nécessite de caractériser le comportement des matériaux soumis à des charges. C'est le rôle de la Rhéologie. Les propriétés rhéologiques sont souvent décrites à l'aide d'éléments mécaniques simples présentant des analogies dans leur comportement mécanique avec celui du matériau étudié. Nous utiliserons cette approche pour détailler les relations caractérisant les matériaux utilisés dans la fabrication des circuits intégrés. Les comportements simples correspondant au solide de Hooke et au liquide de Newton, caractérisant respectivement l'élasticité linéaire et la viscosité, seront passés en revue. Les propriétés des matériaux viscoélastiques seront également étudiées avec les formulations de Maxwell et de Kelvin-Voigt. Finalement, l'élasto-plasticité sera abordée de façon simplifiée, au travers des critères de Tresca et de Von-Mises.*



La formulation du problème mécanique dans les structures intégrées microélectroniques repose sur la définition des contraintes et des déformations, ainsi que sur les relations les unissant.

L'évaluation des états de contraintes mécaniques est basée sur l'hypothèse fondamentale que les corps solides analysés sont formés de matière continue. Les études réalisées se limiteront à déterminer un niveau moyen de contraintes, dans des volumes contenant un nombre grand d'atomes. Le calcul des forces individuelles entre les atomes qui constituent un corps solide est très complexe et dépasse le cadre de ce travail. La matière constituant le corps est donc homogène et uniformément répartie dans le volume, de telle sorte que toute partie élémentaire du corps possède les mêmes propriétés physiques et rhéologiques que le corps lui-même. Nous supposons de plus que les matériaux sont isotropes, c'est à dire que leurs propriétés sont les mêmes dans toutes les directions.

Les problèmes mécaniques sont typiquement tridimensionnels. Cependant dans tous les cas qui nous ont intéressés, les études peuvent être simplifiées en considérant que la dimension  $z$  du corps est très grande devant les autres dimensions. Les déplacements suivant cette direction peuvent alors être considérés nuls en tout point. La déformation est donc aussi nulle. Cette hypothèse de déformations planes permet de réduire la résolution mécanique du système à la détermination des composantes des contraintes normales et de cisaillement dans le plan  $Oxy$  qui ne sont alors fonction que de  $x$  et  $y$ . La composante de la contrainte normale au plan  $Oxy$ , c'est à dire  $\sigma_{zz}$ , qui n'est pas nulle, peut être calculée à partir des autres contraintes normales [1].

### **III-1 Le Tenseur Contrainte**

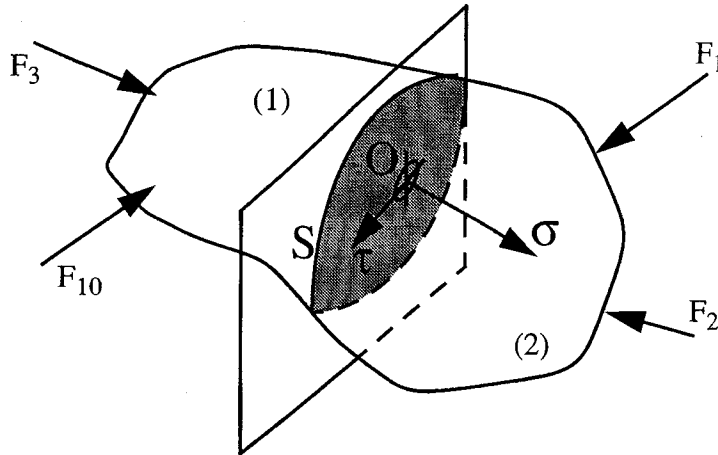
#### **III.1.1-Définition**

Considérons un matériau en équilibre mécanique (Figure III-1). Sous l'action de charges extérieures  $F_1 \dots F_{10}$ , charges qui peuvent être surfaciques (comme une pression hydrostatique) ou volumiques (telles que les forces électrostatiques, magnétiques, thermiques, de gravitation), des forces intérieures prennent naissance et s'exercent entre les différentes parties du corps. Pour déterminer l'effort interne en un point  $O$ , supposons que l'on coupe le corps en deux parties (1) et (2), suivant un plan passant par  $O$ . Suivant le principe de l'action et de la réaction, sous l'effet des forces extérieures qui s'appliquent sur elle, la partie (1) ainsi formée exerce une force sur la partie (2). La partie (2) est donc en équilibre sous l'action des forces extérieures  $F_i$ , qui agissent sur elle, et des forces intérieures exercées par (1), réparties de manière continue suivant la surface de la section transversale  $S$  (Figure III-1:).

L'effort intérieur moyen par élément de surface est donné par la relation:

$$\sigma = \frac{\Delta F}{\Delta S} \quad , \quad (III.1)$$

où  $\Delta F$  est la somme des forces s'exerçant sur l'élément de surface  $\Delta S$ . Lorsque la surface  $\Delta S$  tend vers zéro, cet effort moyen tend vers une limite déterminée, appelée le vecteur contrainte conjugué à la surface  $\Delta S$ , au point O. Ce vecteur contrainte est généralement oblique par rapport à l'élément de surface  $dS$ , et a une composante normale  $\sigma$  et une composante tangentielle  $\tau$  située suivant le plan de l'élément. La composante tangentielle est encore appelée contrainte de cisaillement.



**Figure III-1:** Schéma représentatif des contraintes normales et tangentielles sur un élément de surface  $\Delta S$ . L'équilibre mécanique du corps s'établit sous l'action des forces extérieures  $F_1 \dots F_{10}$  et des efforts intérieurs  $\sigma$  et  $\tau$ .

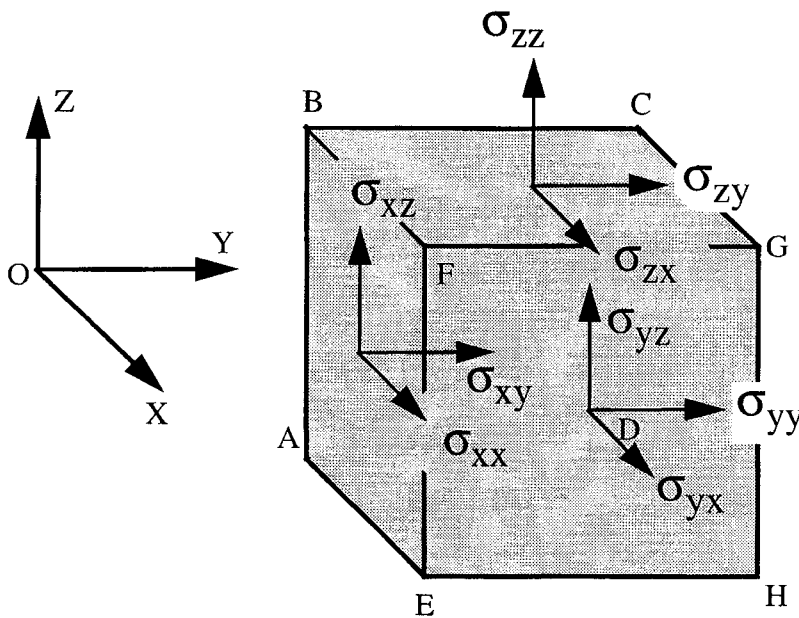
Les contraintes normales et tangentielles sont des forces par élément de surface. Elles sont exprimées en Pascal (P). Cependant, l'unité la plus fréquemment employée dans le domaine de la microélectronique est le dyne/cm<sup>2</sup> (10 dynes/cm<sup>2</sup>=1Pa). La contrainte normale est considérée comme positive lorsqu'elle agit en traction et comme négative lorsqu'elle agit en compression.

### III.1.2-Expression du Tenseur des Contraintes

Considérons maintenant un parallélépipède constituant un volume élémentaire autour du point O du matériau. On appelle  $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}$  les composantes normales du vecteur contrainte agissant sur la facette AEHD, perpendiculaire à l'axe Oz et ( $\sigma_{xy}, \sigma_{yx}$ ) les composantes de cisaillement agissant sur cette même facette. Il en est de même sur tous les autres plans. L'ensemble de ces composantes pour le volume élémentaire définit le tenseur de contrainte. La figure III-2 décrit ces composantes du tenseur des contraintes.

Le tenseur des contraintes est symétrique par rapport à la diagonale principale. Il peut donc s'écrire suivant la notation matricielle suivante:

$$[\sigma] = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (\text{III.2})$$



**Figure III-2:** Définition des composantes tridimensionnelles du champs de contraintes.

## III-2 Déformations dans un Milieu Continu

### III.2.1-Définition

En réponse à des sollicitations extérieures, les éléments d'un corps se déplacent les uns par rapport aux autres, ce qui entraîne localement un changement de forme du corps, que l'on appelle déformation.

La déformation d'un corps est déterminée si l'on connaît à tout instant le vecteur déplacements  $U(u_x, u_y, u_z)$  de chaque point du corps.

On distingue pour chaque déformation, une composante de longueur, qui exprime l'allongement ou le rétrécissement de l'élément et une déformation angulaire, qui correspond à un changement de forme de l'élément sans changement de volume. La déformation

de l'élément est ainsi définie par la donnée de son tenseur de déformations  $[\boldsymbol{\varepsilon}]$ . Si les déplacements sont suffisamment petits, le tenseur des déformations peut être linéarisé par rapport à ces déplacements. On parle alors de tenseur linéarisé des déformations. Dans un tel tenseur, les termes diagonaux correspondent à la variation de longueur (allongement ou rétrécissement) alors que les termes extra-diagonaux expriment une variation angulaire sur le plan.

### III.2.2-Expression de la Déformation en un Point

Supposons un volume élémentaire  $\Delta J = dx dy dz$  du matériau étudié. Si  $\Delta J$  subit une déformation et que l'on considère que les déplacements en chaque point sont infinitésimaux, on peut alors définir les composantes suivant les axes  $x, y, z$  de la déformation de l'élément.

Dans le cas de notre étude, nous nous limitons à des analyses bidimensionnelles. Considérons alors que le système est situé sur le plan Oxy.

Supposons que le point O se déplace suivant x de  $u_x$  et suivant y de  $u_y$ . Soit O' sa nouvelle position. Le déplacement suivant l'axe x d'un point A situé sur cet axe, à la distance dx de l'origine O est donné par:

$$u'_x = u_x + \frac{\partial u_x}{\partial x} \cdot dx \quad (\text{III.3})$$

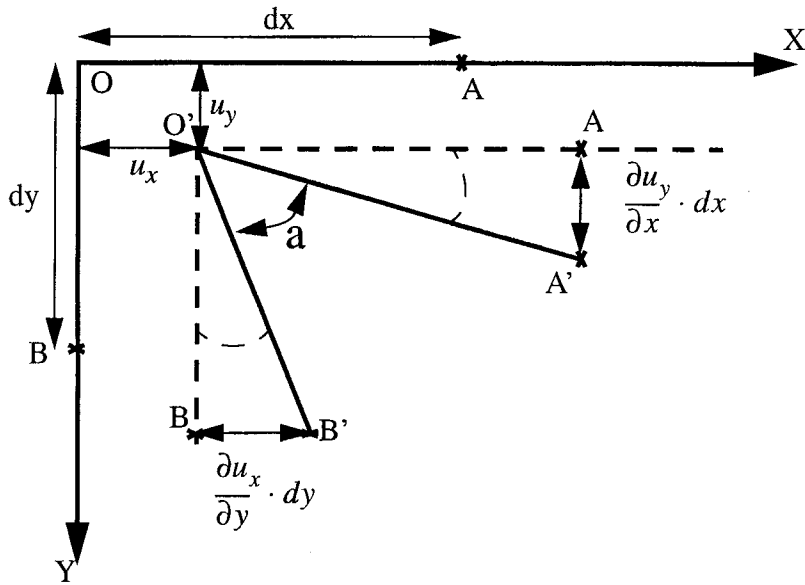
où  $\frac{\partial u_x}{\partial x} \cdot dx$  exprime l'accroissement de longueur de l'élément OA (Figure III-3). De la même manière, suivant la direction y on a la relation exprimant l'extension d'un segment OB.

$$u'_y = u_y + \frac{\partial u_y}{\partial y} \cdot dy \quad (\text{III.4})$$

La déformation de longueur de l'élément correspond à l'allongement par unité de longueur, encore appelée extension. Par conséquent, cette extension dans le sens des x,  $\varepsilon_{xx}$ , est donnée par  $\frac{\partial u_x}{\partial x}$ . De même, suivant la direction y, la déformation  $\varepsilon_{yy}$  est  $\frac{\partial u_y}{\partial y}$ .

Considérons maintenant la modification subie par l'angle que font entre eux les éléments OA et OB (Figure III-3). Le segment O'A', fait avec la direction OA initiale un angle très petit,  $\frac{\partial u_y}{\partial x}$ . De même, le segment O'B' fait avec la direction OB un angle  $\frac{\partial u_x}{\partial y}$ .

Ainsi, l'angle A'O'B', qui au départ était droit, a subi une variation de:  $\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y}$ .



**Figure III-3:** Définition du champs de déplacement sur le plan Oxy.

Nous avons donc, dans le cas de déformations planes, les composantes du tenseur de déformations qui s'expriment comme suit:

$$\epsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x} \quad (\text{III.5})$$

$$\epsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y} \quad (\text{III.6})$$

$$\epsilon_{xy} = \frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \quad (\text{III.7})$$

$$\epsilon_{yx} = \frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \quad (\text{III.8})$$

De même que pour le tenseur de contraintes, on peut démontrer que le tenseur des déformations est symétrique, par rapport à sa diagonale principale. Ceci s'exprime par :

$$\epsilon_{xy} = \epsilon_{yx} = \pi/2 - \alpha$$

### III-3 Principe Fondamental d'Equilibre Mécanique

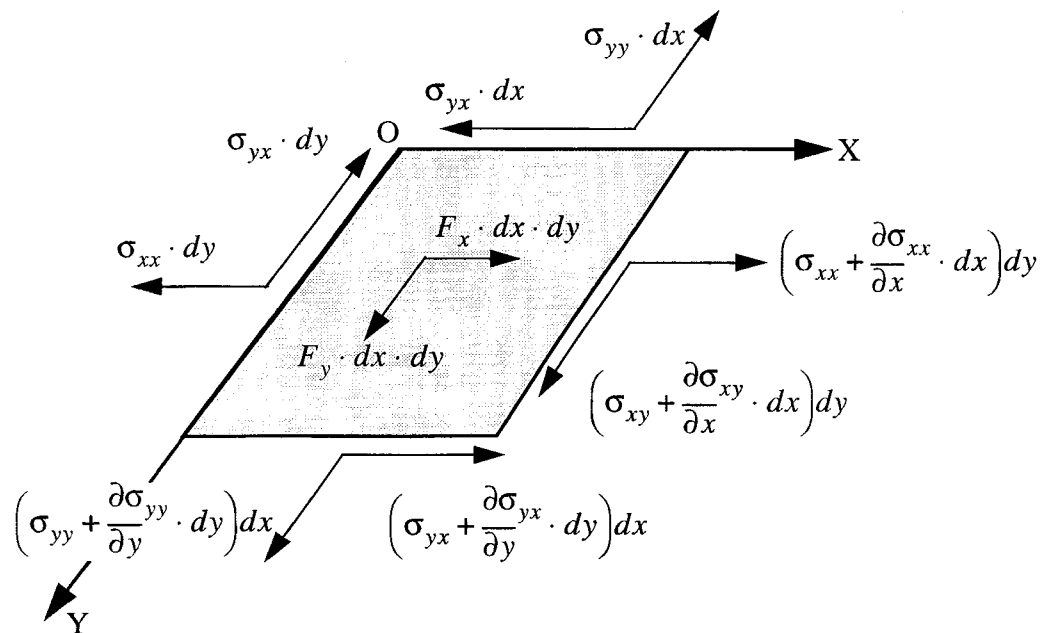
L'étude d'un corps en équilibre mécanique requiert de connaître non seulement toutes les forces extérieures qui le sollicitent, mais aussi les réactions internes à ces forces. Les

forces extérieures sont généralement connues. Les forces internes sont elles inconnues. Le principe général d'équilibre du corps solide permet d'écrire les équations nécessaires pour calculer ces forces de réaction. Il est basé sur le principe fondamental de la dynamique simplifié ici dans des cas statiques, et le principe de l'action et de la réaction:

“Si un système est en équilibre par rapport à un repère absolu, le torseur des forces extérieures s'exerçant sur lui est équivalent à zéro.”

“A chaque instant les actions mutuelles s'exerçant entre deux parties disjointes d'un même système forment un torseur nul”.

Ainsi, tout solide dont on étudie les efforts internes et les déformations doit être considéré comme en équilibre sous l'action des forces extérieures, c'est à dire des charges directement appliquées ou des réactions des appuis. Supposons un élément bidimensionnel du corps étudié, de forme parallélépipédique (Figure III-4). Nous y avons représenté les composantes suivant les axes x et y des forces s'exerçant sur la structure.  $F_x$  et  $F_y$  désignent les composantes d'une éventuelle force extérieure, de volume, dont les résultantes sont donc  $F_x dx dy$  et  $F_y dx dy$ .



**Figure III-4:** Définition des efforts internes et externes sur une structure parallélépipédique élémentaire.

L'expression du principe d'équilibre sur cet élément nous permet d'obtenir les deux relations suivantes:

suitant l'axe des x:

$$\left( \left( \sigma_{xx} + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} \cdot dx \right) - \sigma_{xx} \right) \cdot dy + \left( -\sigma_{yx} + \left( \sigma_{yx} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} \cdot dy \right) \right) \cdot dx + F_x \cdot dx \cdot dy = 0 \quad (\text{III.9})$$

suivant l'axe des y:

$$\left( \left( \sigma_{yy} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} \cdot dy \right) - \sigma_{yy} \right) \cdot dx + \left( \left( \sigma_{xy} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} \cdot dx \right) - \sigma_{yx} \right) \cdot dy + F_y \cdot dx \cdot dy = 0 \quad (\text{III.10})$$

ce qui donne après simplifications:

$$\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} + F_x = 0 \quad (\text{III.11})$$

$$\frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + F_y = 0 \quad (\text{III.12})$$

Ces équations doivent être satisfaites en tout point intérieur du solide. Elles sont appelées équations indéfinies d'équilibre.

Remarque : Le lecteur désirant approfondir les notions exposées dans les paragraphes ci-dessus peut se référer, entre autres, aux ouvrages donnés en référence [1], [2], [3], [4].

### III-4 Notions de Rhéologie Appliquée aux Matériaux de la Microélectronique

L'analyse des contraintes mécaniques dans une structure consiste à étudier son comportement aux charges appliquées compte tenu de la manière dont ces charges sont appliquées. C'est l'objet de la Rhéologie, qui comme branche de la mécanique des milieux continus, a pour finalité de rendre compte du comportement des matériaux soumis à des états de contraintes ou de déformations. Cette étude aboutit à l'établissement des relations liant contraintes et déformations en tout point du matériau.

La théorie générale des tenseurs permet de formuler mathématiquement un tenseur comme somme d'une composante sphérique et d'une composante de déviation.

$$T_{ij} = T_m^v + T_{ij}^s$$

où  $T_m^v$  est la composante sphérique, encore appelée composante de dilatation, et  $T_{ij}^s$  la composante de déviation.  $T_{ij}$  est le tenseur total.

Les expressions respectives de ces deux termes sont:

$$T_m^v = \frac{1}{3} \sum_{i=j} T_{ii} = \frac{1}{3} \text{trace}(T_{ii}) I, \text{ } I \text{ étant le tenseur unité,}$$

$$T_{ij}^s = T_{ij} - \left( \frac{1}{3} \sum_i T_{ii} \right) \delta_{ij}, \text{ où } \delta_{ij} \text{ correspond au symbole de Kronecker.}$$

Dans le cas du tenseur des déformations, cette décomposition présente l'avantage de mettre en évidence des déformations purement volumiques de contraction ou d'expansion, données par le terme de dilatation  $\epsilon^v$ , et les modifications de forme, sans variations de volume, exprimées par la partie de déviation  $\epsilon^s$ .

De la même manière, le tenseur de contraintes se décompose en sa composante sphérique et de déviation, que nous notons respectivement  $\sigma^v$  et  $\sigma^s$ .

Par conséquent, le comportement d'un matériau nécessite, pour être totalement défini, de déterminer complètement les deux séries de relations unissant contraintes et déformations. La première, qui relie les composantes de dilatation des tenseurs de contrainte et de déformation, constitue l'équation de dilatation:

$$F^v(\sigma^v, \dot{\sigma}^v, \epsilon^v, \dot{\epsilon}^v) = 0 \quad (\text{III.13})$$

La seconde, appelée relation de déviation, relie les composantes de déviation des tenseurs de contrainte et de déformation:

$$F^s(\sigma^s, \dot{\sigma}^s, \epsilon^s, \dot{\epsilon}^s) = 0 \quad (\text{III.14})$$

Dans les équations (III.13) et (III.14),  $\sigma$ ,  $\dot{\sigma}$ ,  $\epsilon$ ,  $\dot{\epsilon}$  sont respectivement la contrainte et sa vitesse d'application, la déformation et sa vitesse de déformation.

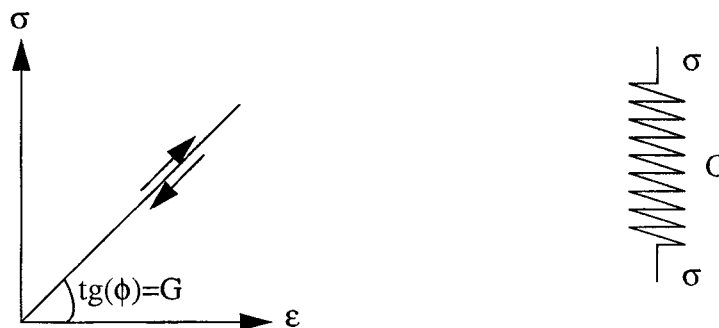
Caractériser un matériau consiste donc à déterminer les lois de comportement  $F^v$  et  $F^s$  reliant les contraintes et les déformations. Les essais classiques de caractérisation en traction/compression, consistant à appliquer à une éprouvette test un état de déformation ou de contrainte uniforme, vont permettre de tracer des courbes donnant la contrainte en fonction de la déformation ou vice-versa et ainsi de déterminer les relations (III.13) et (III.14). L'allure qualitative de la réponse des matériaux à ces essais permet de les classer en matériaux rigides, élastiques, visqueux, plastiques. De plus, la nature du corps, solide ou liquide, va être déterminée par la relation caractéristique en déviation  $F^s$ . Si les contraintes peuvent se relaxer via un écoulement ou une déformation irréversible alors le matériau est un liquide. Dans le cas contraire, c'est un solide.



Le comportement d'un matériau, c'est à dire la réponse à des essais simples, est souvent décrit à l'aide de modèles analogiques. Ces modèles analogiques sont des groupements d'éléments mécaniques, tels que le ressort, le patin, le piston, la butée, dont les réponses à des sollicitations simples sont similaires à celles des matériaux. Ils permettent de donner une image concrète des équations de comportement (III.13) et (III.14), et de rendre compte des principales caractéristiques rhéologiques du matériau. Ces éléments analogiques ne sont que des symboles et n'ont rien de commun avec la structure physique des matériaux. Ainsi, le comportement élastique linéaire, qui correspond à une relation linéaire entre la contrainte et la déformation, peut être schématisé par un ressort. De même, l'amortisseur schématise la viscosité linéaire ou non et le patin rend compte d'un seuil de contraintes. Ces éléments seront utilisés dans la suite de l'exposé pour décrire les comportements des matériaux mis en oeuvre au cours de la fabrication des circuits intégrés.

### III.4.1-Le Comportement Élastique Linéaire

La plupart des matériaux présentent un diagramme  $\sigma=f(\epsilon)$  qui débute par une partie linéaire appelée droite de Hooke (Figure III-5). Cette partie correspond à un comportement élastique linéaire, pour lequel les déformations sont totalement réversibles: le corps retrouve sa forme initiale dès que la charge ayant provoqué la déformation est supprimée.



**Figure III-5:** Modèle mathématique uniaxial schématisant le comportement élastique linéaire.

Dans ce régime élastique, on peut écrire la relation suivante

$$\sigma = G \cdot \epsilon \quad (\text{III.15})$$

où  $G$  est le module d'élasticité. Si les relations de dilatation et de déviation respectent toutes les deux la loi de Hooke, on parlera de solide de Hooke. Le solide de Hooke peut être représenté par un ressort de rigidité  $G$ , exprimant la relation entre la contrainte et la déformation, comme illustré sur la figure III-5.

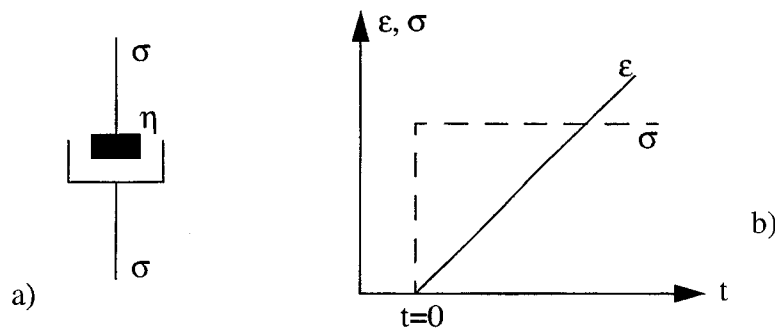
### III.4.2-Le Comportement Visqueux

Le comportement de certains matériaux peut présenter à haute température des déformations visqueuses sous charge [5]. Dans ce régime d'écoulement visqueux, ces matériaux suivent un comportement caractéristique, qui correspond au comportement du liquide de Newton. Celui-ci est déterminé par une relation linéaire entre la contrainte et la vitesse de déformation. C'est ce qu'on appelle la loi de déformation visqueuse de Newton, qui s'exprime par l'équation suivante:

$$\sigma = \eta \cdot \dot{\epsilon} \quad (\text{III.16})$$

$\dot{\epsilon}$  est la vitesse de déformation et  $\eta$  la viscosité. Cette relation est la modélisation la plus simple de déformations dépendantes du temps. Toute contrainte appliquée au corps, si petite soit elle, va produire une déformation sans cesse croissante. Elle ne cessera d'augmenter que lorsque la charge s'annulera, et elle gardera alors sa valeur acquise. Ce modèle linéaire ne présente pas de recouvrance (retour progressif aux dimensions et propriétés initiales, lors de la suppression des charges), par contre la relaxation des contraintes y est instantanée.

Le comportement visqueux peut être représenté à l'aide d'un amortisseur, de viscosité  $\eta$ , comme illustré sur la figure III-6



**Figure III-6:** Modèle analogique schématisant le comportement visqueux. La partie b) de la figure représente la réponse à un essai caractéristique de fluage.

Le liquide de Newton est caractérisé par la loi de Newton qui s'applique au tenseur contrainte/déformation en déviation. C'est ce qui lui attribue le caractère de liquide. Les parties de dilatation suivent quant-à-elles un comportement linéaire élastique:

$$F^v : \sigma^v - \chi \epsilon^v = 0 \quad (\text{III.17})$$

$$F^s : \sigma^s - \eta \dot{\epsilon}^s = 0 \quad (\text{III.18})$$

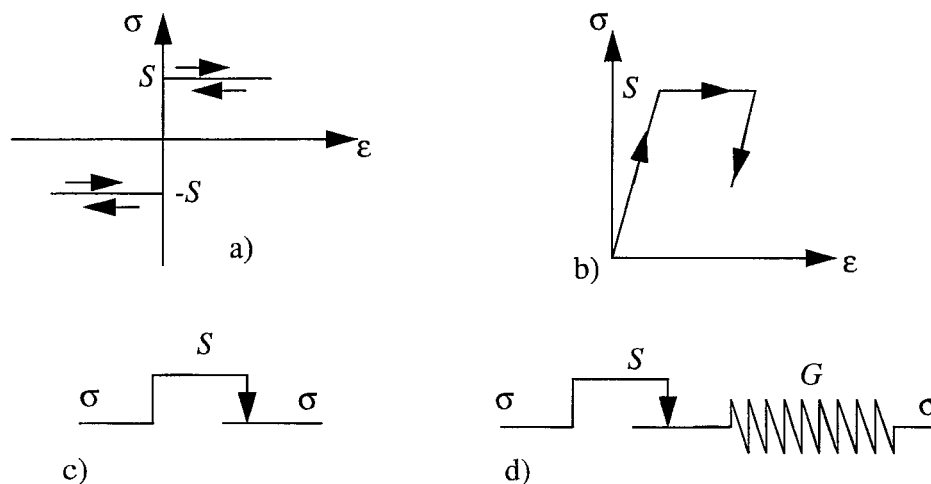
où  $\chi$  et  $\eta$  sont respectivement le module de compressibilité et la viscosité du matériau.

### III.4.3-Le Comportement Plastique

Finalement, le troisième comportement élémentaire que nous devons modéliser

est le comportement plastique. Ce comportement est défini par un niveau de seuil en contrainte au dessus duquel les déformations prennent une valeur indéterminée et deviennent irréversibles. Les contraintes restent alors constantes et égales à ce maximum. Ce comportement est valable en charge et en décharge.

Si on suppose que les déformations atteintes par l'élément avant le seuil (généralement des déformations élastiques) sont négligeables, on obtient un corps rigide parfaitement plastique, qui correspond au modèle élémentaire que l'on peut schématiser à l'aide d'un patin, de seuil  $S$ . Celui-ci est bloqué tant que  $|\sigma| < S$  et glisse ensuite, forçant la contrainte à rester entre  $-S$  et  $+S$ . Le diagramme contraintes/déformations pour un matériau parfaitement plastique est donné dans la figure III-7a. Si la déformation sous le seuil suit une loi élastique, on parle alors de corps élasto-plastique. C'est ce type de comportement qui sera modélisé dans notre travail. Le diagramme de réponse d'un tel matériau est également donné ci-dessous (Figure III-7d).



**Figure III-7:** Représentation schématique des comportements plastiques:

- (a) Rigide plastique: la déformation sous le seuil est négligée.
- (b) Elasto-plastique: la déformation sous le seuil suit une loi élastique.
- (c) Le modèle analogique symbolisant la plasticité est le patin de seuil  $S$ .
- (d) Associé à un ressort, il permet de reproduire le comportement élasto plastique.

Les modèles décrits ci-dessus correspondent à des comportements élémentaires. Cependant, dans la réalité, les matériaux utilisés dans les procédés de fabrication des circuits intégrés présentent des comportements plus complexes, qui ne sont ni purement élastiques ou visqueux, ni seulement plastiques. Ces comportements dépendent de la température, de l'état de contrainte initiale. Généralement, à basse température, les matériaux sont élastiques et deviennent viscoélastiques voire visqueux, lorsque la température augmente.

C'est le cas de l'oxyde de silicium [5], pour lequel au dessus d'environ  $975^\circ\text{C}$  le caractère visqueux s'applique, avec une viscosité diminuant avec la température. Le nitrure de silicium possède des propriétés similaires [6]. Quand au silicium, un régime plastique apparaît au dessus d'un certain seuil de contraintes, avec formation de déformation irréversibles, qui viennent s'ajouter aux déformations élastiques. Il est donc élastoplastique [7][8].

Les propriétés mécaniques de tels matériaux plus complexes peuvent être traitées en associant les différents comportements élémentaires vus ci-dessus, en série ou en parallèle. Pour les matériaux dont le modèle comportemental est obtenu par l'association en série d'éléments simples, la déformation totale est la somme des déformations élémentaires; la contrainte totale est elle égale aux contraintes de chaque élément.

$$\varepsilon = \sum_i \varepsilon_i \quad \text{et} \quad \sigma = \sigma_i \quad , \quad (\text{III.19})$$

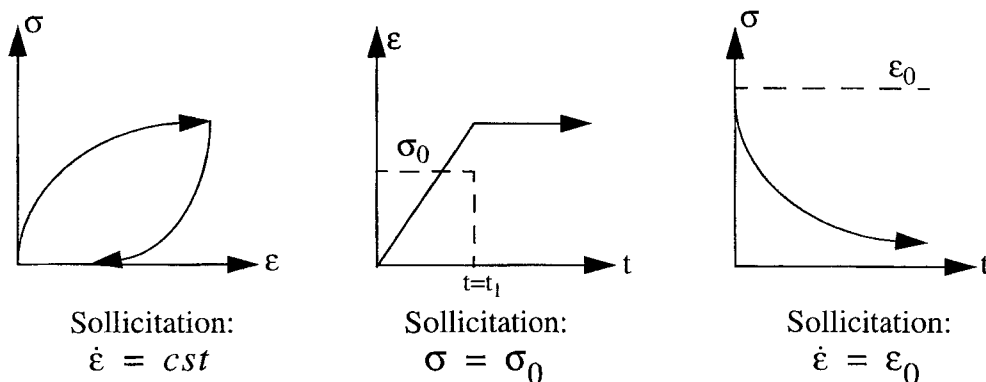
De la même manière, pour les matériaux dont le modèle comportemental est obtenu par l'association en parallèle d'éléments simples, la contrainte totale est la somme des contraintes élémentaires; la déformation de l'ensemble est égale à la déformation de chaque élément.

$$\sigma = \sum_i \sigma_i \quad \text{et} \quad \varepsilon = \varepsilon_i \quad . \quad (\text{III.20})$$

#### III.4.4-Le Comportement Viscoélastique

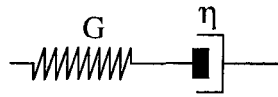
Certains matériaux étudiés dans ce travail ont un comportement viscoélastique. Celui-ci se caractérise par une dépendance de la vitesse de déformation avec la contrainte appliquée. On parle de matériaux de type liquide de Maxwell ou de type solide de Kelvin-Voigt.

Le liquide de Maxwell est caractérisé par les réponses suivantes aux essais d'identification:



**Figure III-8:** Réponses caractéristiques aux essais d'identification. La sollicitation est indiquée en pointillés, la réponse est donnée en traits pleins.

Le modèle analogique permettant de reproduire ce type de réponse à des sollicitations élémentaires est appelé modèle de Maxwell. Il est constitué d'un ressort, de module  $G$ , et d'un amortisseur, de viscosité  $\eta$ , associés en série.



L'équation constitutive de cette association est: 
$$\dot{\epsilon} - \left( \frac{\dot{\sigma}}{G} + \frac{\sigma}{\eta} \right) = 0 \quad (\text{III.21})$$

La résolution de cette équation, en prenant une sollicitation en déformation constante ( $\epsilon = \epsilon_0$  pour  $t > 0$ ) permet de déterminer la réponse du modèle à un échelon de déformation.

On obtient: 
$$\sigma(t) = G\epsilon_0 \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (\text{III.22})$$

où  $\tau = \eta/G$  est la constante de temps caractéristique de l'élément.

Un tel élément peut subir une déformation élastique instantanée lorsqu'on lui applique un état de contraintes. Cette déformation est modélisée par le ressort. Cette élasticité ne se fait sentir que sur un temps très court (par rapport  $\tau$ ), et si la contrainte est maintenue constante sur un intervalle de temps important, le corps subit un écoulement. Cet effet est modélisé par l'action du piston. De plus, ce matériau permet une relaxation des contraintes dans le temps, en fonction de la constante de temps  $\tau$  [9].

La modélisation du liquide de Maxwell fait appel à un élément de Maxwell pour la composante de déviation du matériau ( $F^d$ ). Celui-ci est associé à un ressort pour la partie de dilatation. Le liquide de Maxwell possède bien la propriété caractéristique des liquides puisque le terme de déviation autorise une relaxation des contraintes.

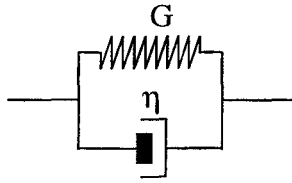
Le solide de Kelvin est quant à lui caractérisé par des réponses différentes aux essais d'identification générale (Figure III-9).

L'équation d'état rhéologique est la suivante:

$$\sigma - (\chi\epsilon + \eta\dot{\epsilon}) = 0 \quad (\text{III.23})$$

Ce comportement peut être modélisé à l'aide du ressort de l'élasticité et du piston de la viscosité.

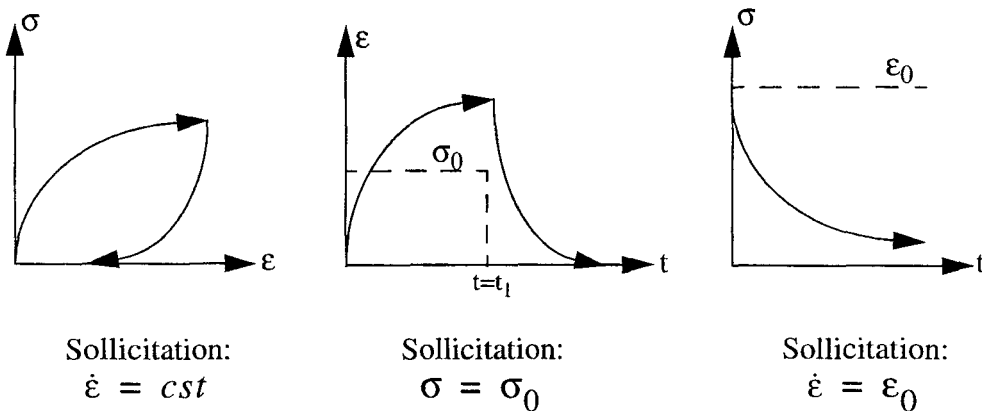
L'association de ces deux éléments se fait en parallèle:



Contrairement au liquide de Maxwell, l'élément de Kelvin-Voigt ne peut subir de déformations instantanées. Si on applique à un échantillon une sollicitation en contrainte à l'instant  $t$  (test de fluage), la déformation apparaîtra au cours du temps, suivant l'expression:

$$\varepsilon(t) = \frac{\sigma_0}{G} \cdot \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right\} \quad (\text{III.24})$$

où  $\tau = \eta/G$  est la constante de temps caractéristique de l'élément. C'est ce qu'on appelle le post-effet élastique. Cependant, le comportement final du matériau est de type élastique, puisque au bout d'un temps grand devant la constante de temps  $\tau$ , (et théoriquement infini), le corps retrouve une déformation  $\varepsilon = \sigma/G$ , élastique. Ce post-effet élastique se fait également ressentir lorsque l'élément est chargé et que l'on supprime brusquement la charge. La réversibilité n'est pas immédiate, mais retardée. On peut également noter que le corps de Kelvin-Voigt n'autorise pas de relaxation des contraintes, puisque lorsque la déformation est constante, ( $\dot{\varepsilon} = 0$ ), la contrainte est constante



**Figure III-9:** Réponses caractéristiques aux essais d'identification dans le cas d'un solide viscoélastique de Kelvin-Voigt. La sollicitation est indiquée en pointillés, la réponse est donnée en traits pleins.

L'élément de Kelvin-Voigt est généralement introduit dans la partie de déviation des tenseur de contrainte (équations d'état III.14). Il est alors associé à un ressort pour la partie de dilatation, constituant ainsi le solide de Kelvin-Voigt. Il s'agit bien d'un solide, puisque ni la

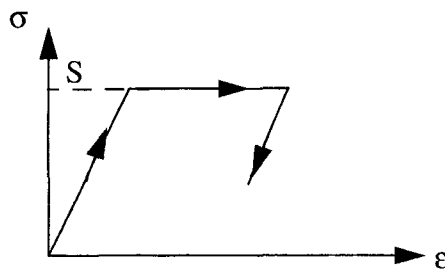
composante de dilatation, ni celle de déviation ne peuvent se relaxer.

Les matériaux de type viscoélastiques peuvent donc être classés en liquide de Maxwell ou en solide de Kelvin Voigt. Si le matériau présente une réversibilité immédiate, on parlera de liquide de Maxwell. Dans le cas où la réversibilité est retardée, on aura un solide de Kelvin.

Il est à noter que d'autres combinaisons ont été proposées pour exprimer les composantes  $F^s$  et  $F^v$ . Ces différentes formulations permettent de rendre compte de phénomènes particuliers. On peut par exemple citer la modélisation de Rafferty [10] qui a proposé d'introduire l'élément de Kelvin-Voigt dans la composante de dilatation ( $F^v$ ), en association avec un amortisseur pour la composante de déviation ( $F^s$ ), afin d'étudier le comportement d'écoulement mécanique de l'oxyde de silicium. L'effet d'élasticité différé introduit par  $F^v$  permet de modéliser la densification de l'oxyde au cours d'un recuit à haute température. Le matériau ainsi modélisé correspond à un liquide, puisque une relaxation des contraintes est permise à travers la partie de déviation ( $F^s$ ).

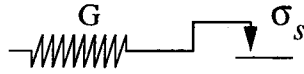
### III.4.5-Le Comportement Elasto-Plastique

Finalement, la modélisation des matériaux utilisés dans notre travail nécessite d'introduire le comportement élasto-plastique. Ce comportement est observé dans la plupart des métaux, comme l'aluminium, et également pour le silicium monocristallin [8]. Ces matériaux, dits ductiles, se comportent localement de manière élastique tant que la contrainte en un point reste inférieure à une limite apparente d'élasticité. Lorsque celle-ci est dépassée, la contrainte en ce point cesse de croître et la déformation peut prendre une valeur indéterminée. Les déformations deviennent alors localement irréversibles. En cas de déchargement à partir d'un point quelconque du palier de contraintes, le matériau se comporte de nouveau élastiquement. La réponse aux essais d'écroutissage est illustrée dans la figure III-10:



**Figure III-10:** Courbe d'écroutissage donnant la relation contrainte en fonction de la déformation caractéristique d'un solide élastique parfaitement plastique.

Le modèle analogique correspondant est le modèle de Saint-Venant, qui associe un ressort de constante élastique  $G$  en série avec un patin de seuil  $\sigma_s$ .



Il est régi par les équations d'état suivantes:

$$|\sigma| < \sigma_s \rightarrow \varepsilon = \frac{\sigma}{G} \quad (\text{III.25})$$

$$|\sigma| = \sigma_s \rightarrow \varepsilon = \frac{\sigma}{G} + \varepsilon_p \quad (\text{III.26})$$

où  $\varepsilon_p$  est la déformation plastique irréversible et arbitraire.

Lorsqu'on fait des essais en traction uniaxiale sur des matériaux ductiles, on constate que le comportement plastique devient observable au dessus d'un certain seuil de contraintes. Ce seuil est le critère de plasticité.

Différents critères peuvent être avancés pour déterminer la plasticité. Le critère de Tresca est basé sur des observations expérimentales qui montrent que les déformations permanentes sensibles se produisent par glissement relatifs des couches du matériau les unes sur les autres. Ces déformations doivent donc apparaître lorsque la contrainte tangentielle dépasse un maximum. Si on considère un repère principal, on montre que la contrainte tangentielle est maximale sur les plans passant par chacun des axes principaux et bissecteurs de l'angle que font les deux autres axes principaux. Dans ce cas, les contraintes de cisaillement maximales s'écrivent :

$$\sigma_{max} = \pm \frac{1}{2}(\sigma_{ii} - \sigma_{jj}) \quad \text{avec } i \neq j, \quad (\text{III.27})$$

où  $i$  et  $j$  représentent les directions  $x$ ,  $y$  ou  $z$ .

Dans le cas qui nous intéresse, celui des déformations planes, la représentation de Mohr permet d'exprimer la contrainte tangentielle maximale en fonction des composantes  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$ , et  $\sigma_{xy}$ . [1].

$$\sigma_{max} = \pm \sqrt{\left(\frac{\sigma_{xx} - \sigma_{yy}}{2}\right)^2 + \sigma_{xy}^2} \quad (\text{III.28})$$

Si on considère  $\sigma_c$  la contrainte de comparaison avec le limite d'élasticité, le critère de Tresca s'écrit :

$$\sigma_c = \sqrt{\left(\frac{\sigma_{xx} - \sigma_{yy}}{2}\right)^2 + \sigma_{xy}^2} < \sigma_s \quad (\text{III.29})$$



où  $\sigma_s$  étant la limite d'élasticité du matériau.  $\sigma_c$  n'est pas une contrainte qui se produit réellement dans le corps, mais seulement une grandeur commode pour évaluer le danger de dépassement du seuil d'élasticité.

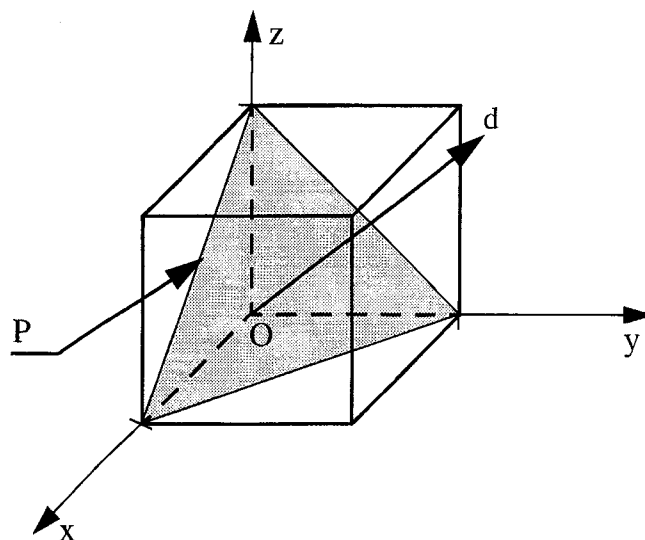
Le deuxième critère utilisé pour déterminer le seuil de plasticité est le critère de Von-Mises. Ce critère est souvent préféré au critère de Tresca dans les calculs numériques sur ordinateur. Il a en effet l'avantage d'être en meilleur accord avec les résultats expérimentaux et d'être continu [11].

Le critère de plastification de Von Mises s'écrit :

$$\sigma_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2} \quad (\text{III.30})$$

où  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$ ,  $\sigma_{zz}$  sont les trois composantes principales du tenseur de contraintes et  $\sigma_c$  la contrainte de comparaison.

On peut montrer que l'équation (III.30) ci-dessus, donnant  $\sigma_c$ , est proportionnelle à la contrainte de cisaillement octaédrique. Cette contrainte octaédrique se définit en effet comme étant la contrainte agissant sur une face de l'octaèdre inscrit dans le cube construit sur les trois contraintes principales ( $\sigma_{xx}, \sigma_{yy}, \sigma_{zz}$ ). Le plan octaédrique est illustré sur la figure suivante (figure III-11), en hachuré



**Figure III-11:** Définition du plan octaédrique P inscrit dans le cube construit sur les trois contraintes principales, dans un repère principal.

L'axe d correspond à l'axe trisecteur des axes principaux x, y et z, et est la normale au plan P. Il peut être intéressant de noter que, dans le repère principal, d représente la partie sphérique du tenseur de contraintes, et P son déviateur [11].

Dans ce repère principal, la contrainte de cisaillement octaédrique s'écrit:

$$\tau_{oct} = \pm \frac{1}{3} \sqrt{(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^2} \quad (\text{III.31})$$

Elle est donc égale à  $\frac{\sqrt{2}}{3} \sigma_c$ .

A la limite de plasticité, le critère de Von Mises impose  $\sigma_0 = \sigma_s$  soit donc

$$\tau_{oct} = \frac{3}{\sqrt{2}} \sigma_s, \sigma_s \text{ étant la limite d'élasticité du matériau.}$$

### III-5 Conclusion: Validité de l'Analyse Rhéologique Exposée

Les éléments de rhéologie exposés dans ce chapitre doivent être appliqués avec précautions dans le domaine d'étude de la microélectronique. En effet, ces notions sont vérifiées pour des systèmes volumiques alors que le comportement mécanique d'un matériau dif-fère, suivant qu'il est sous forme volumique ou sous forme de couche mince.

Cependant l'approche pragmatique de notre travail a consisté à adopter des modèles rhéologiques simples, permettant de constituer un outil de calcul généralisé des contraintes mécaniques dans une structure. Sur cette première base de travail, des études approfondies de calibration des propriétés mécaniques des matériaux en couche mince seront par la suite possibles. Elles seront nécessaire afin de reproduire le plus justement possible les comportements mécaniques observés.

## Références Bibliographiques du Chapitre 3

- [1] S. Timoshenko et J.N. Goodier, "Théorie de l'Elasticité", Editions Librairies Polytechnique Béranger, pp. 15-19, 1961.
- [2] Ch. Massonnet, G Duprez, R. Maquoi, R. Muller, G Fonder, "Calcul des Structures sur Ordinateur; Tome 1: Analyse Matricielle des Structures", Chapitre 2, p. 52, Editions Masson, 1972.
- [3] Ch. Massonnet et S. Cescotto, "Mécanique des Matériaux", Editions De Boeck Université, 1992.
- [4] C.T. Wang, "Applied Elasticity", Mc Graw-Hill Book Company, New-York, 1953.
- [5] E.P Eernisse, "Viscous Flow of Thermal SiO<sub>2</sub>", Applied Physics Letter, vol. 30, p. 290, 1977.
- [6] P. Ferreira, V. Senez, D. Collard et B. Baccus, "Study of Local Silicon Oxidation with Calibrated Nitride Model", Proceedings of ESSDERC94, pp. 259-261, 1994.
- [7] T. Uchida, N. Kotani, K. Kobayashi, Y. Mashiko, and N. Tsubouchi, "A Simulation of Plastic Deformation of Silicon During Thermal Oxidation", Proceedings of IEDM 93, pp. 315-318, 1993.
- [8] J.R. Patel and A. R. Chaudri, "Macroscopic Plastic Properties of Dislocation-Free Germanium and Other Semiconductor Crystals. I. Yield Behaviour," J. Appl. Phys., vol. 34, pp. 2788-2799, September 1963.
- [9] J.C Maxwell, "On the Dynamical Theory of Gases", J. Philosophical Magazine, vol 35, p. 129, 1867.
- [10] C.S. Rafferty, L.M. Landsberger, R.W. Dutton and W.A. Tiller, "Non-Linear Viscoelastic Dilatation of SiO<sub>2</sub> Films", Applied Physics Letters, vol. 54, p. 151, 1989.
- [11] J. Lemaitre et J.L. Chaboche, "Mécanique des Matériaux Solides", Editions Dunod, 1985.

# Chapitre 4

---

## *IV- L'Approche Numérique dans IMPACT-4*

*Ce chapitre détaille l'approche numérique utilisée dans ce travail de thèse pour calculer les contraintes mécaniques. Cette solution numérique a été implantée dans la dernière version du simulateur 2D de procédés technologiques IMPACT-4 v4.8. Elle s'appuie sur une formulation basée sur la méthode des éléments finis et intègre des algorithmes complexes permettant de garantir la précision des résultats tout en préservant un temps de calcul non prohibitif.*

*Après avoir développé le principe fondamental de la dynamique sous le formalisme "éléments finis", nous exposerons la stratégie employée pour inclure numériquement les phénomènes générateurs de contraintes et les comportements rhéologiques exposés dans les chapitres précédents dans la solution du problème mécanique. Nous expliquerons finalement les choix que nous avons effectué, par rapport à la gestion du maillage et à la résolution des équations.*

L'approche adoptée dans ce travail pour calculer les contraintes mécaniques dans les structures intégrées microélectroniques s'inspire des techniques de calcul de structures mécaniques. La méthode des éléments finis permet de résoudre les équations continues régissant l'équilibre mécanique de la structure sur un nombre fini d'éléments. Elle est particulièrement adaptée à ce genre d'étude comme cela sera justifié dans la partie IV-6.

Les problèmes abordés par la mécanique des matériaux sont typiquement tridimensionnels. Ils sont cependant largement simplifiés lorsque les contraintes sont toutes parallèles à un plan. On se place alors dans le cas de contraintes planes. On arrive aux mêmes simplifications lorsque l'on considère qu'une dimension du corps - la direction z par exemple - est très grande par rapport aux autres. On parle alors de déformations planes et on peut supposer que toutes les sections planes prises suivant la direction z sont dans le même état [1]. Cette dernière hypothèse s'applique dans notre cas : l'ensemble des développements sont effectués avec l'hypothèse des déformations planes.

#### **IV-1 Formulation du Principe d'Equilibre par le Formalisme des Eléments Finis**

Le calcul général des contraintes mécaniques est basé sur la résolution des équations d'équilibre dans la structure simulée. Ces équations ont été données dans le chapitre précédent (équations (III.11) et III.12). Elles expriment l'équilibre mécanique entre les efforts internes et les forces extérieures au sein des matériaux constituant le domaine de simulation. Cet équilibre peut s'exprimer également en termes de travaux: le travail des efforts internes est égal au travail des charges appliquées au système.

Un bilan des forces extérieures agissant sur la structure fait apparaître des forces de surface et de volume, notées respectivement sous forme matricielle  $[F_s]$  et  $[F_v]$ , dont les travaux s'écrivent :

$$W_{F_s} = \int_S [U]^T \cdot [F_s] dS \quad (IV.1)$$

$$W_{F_v} = \int_V [U]^T \cdot [F_v] dV \quad (IV.2)$$

ainsi que des forces locales appliquées,  $[F_i]$ , dont le travail est :

$$\sum_i [U]^T \cdot F_i \quad (IV.3)$$

Dans les relations (IV.1), (IV.2), et (IV.3),  $[U]$  est le vecteur déplacement.

Dans un solide soumis à une contrainte  $\sigma$ , une variation de déformation  $\Delta \epsilon$ , engendrant une variation de contrainte  $\Delta \sigma$ , nécessite un travail :

$$\Delta W_f = \int_V \sigma \Delta \varepsilon dV \quad (\text{IV.4})$$

L'égalité entre les travaux internes et externes s'exprime donc suivant l'équation:

$$\int_V [\sigma] \Delta [\varepsilon] dV = \int_V [U]^T \cdot [F_B] dV + \int_S [U]^T \cdot [F_S] dS + \sum_i [U]^T \cdot F_i \quad (\text{IV.5})$$

où  $[\varepsilon]$ ,  $[U]$ ,  $[\sigma]$  sont respectivement le vecteur déformation, le vecteur déplacement et le vecteur contrainte.

Le formalisme élément finis nous permet de simplifier la résolution de l'équation (IV.5), qui est un problème continu, en exprimant l'équilibre uniquement aux noeuds du maillage de la structure. Pour cela, nous introduisons les fonctions de forme  $[N]$ , qui nous permettent d'exprimer les déplacements en tout point d'un élément du système  $\overline{[U]}^e$ , en fonction des vecteurs déplacement aux noeuds de cet élément  $[U]^e$ , par la relation :

$$\overline{[U]}^e = [N]^e \cdot [U]^e, \quad (\text{IV.6})$$

Le choix des fonctions de forme se fait suivant le type et la complexité des éléments choisis [2].

D'autre part, dans l'approximation des déformations planes, nous avons :

$$[\varepsilon] = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial U_x}{\partial x} \\ \frac{\partial U_y}{\partial y} \\ \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial x} \end{bmatrix} \times [U] \quad (\text{IV.7})$$

$$\text{soit sous forme matricielle abrégée } [\varepsilon] = [B] \cdot [U] \quad (\text{IV.8})$$

Finalement la formulation des propriétés rhéologiques des matériaux nous permet d'établir une relation entre les contraintes et les déformations, qui exprimée sous forme matricielle s'écrit:

$$[\sigma] = [D] \cdot [\varepsilon] \quad (\text{IV.9})$$

Tant que l'on est en déformation élastique, où  $\sigma$  est proportionnelle à  $\varepsilon$ ,  $[D]$  est appelée matrice d'élasticité du matériau et traduit ses propriétés mécaniques. Cette équation s'applique donc dans le cas de matériaux élastiques mais nous verrons qu'elle peut également s'écrire pour d'autres types de comportements, sous certaines conditions.

Compte tenu de ces remarques, l'équation (IV.5) devient :

$$\int_V [U]^T \cdot [B]^T \{ [D]([B][U] - [\varepsilon_0]) + [\sigma_0] \} dV = \int_V [U]^T \cdot [N]^T \cdot [F_B] dV + \int_S [U]^T \cdot [N]^T \cdot [F_S] dS + \sum_i [U]^T \cdot [N]^T \cdot F_i \quad (IV.10)$$

ce qui peut également s'écrire après calculs ([2]):

$$\left( \int_V [B]^T \cdot [D] \cdot [B] dV \right) [U]^e = [F]_T \quad (IV.11)$$

en notant  $[F]_T$  la somme des forces nodales dûes :

(i) aux charges réparties en volume  $\int_V [N]^T \cdot [F_B] dV$

(ii) aux charges réparties en surface  $\int_S [N]^T \cdot [F_S] dS$

(iii) aux charges externes  $\sum [F_i]$ ,

(iv) ainsi qu'aux efforts causés par les pré-contraintes et les pré-déformations, respectivement  $-\int_V [B]^T \cdot [\sigma_0] dV$  et  $\int_V [B]^T \cdot [D] \cdot [\varepsilon_0] dV$ .

On rappelle que  $[\varepsilon] = [B] \cdot [U]$  (équation (IV.8))

L'équation (IV.11) s'écrit encore :

$$[K] [U]^e = [F]_T \quad (IV.12)$$

où  $[K]$  est appelée matrice de raideur.

La résolution de l'équation d'équilibre que l'on obtient nécessite de déterminer en chaque noeud de la structure la matrice de raideur  $K$ . Or  $K$  s'exprime en fonction de  $D$ , la matrice rhéologique dépendante du matériau étudié et exprimant son comportement mécanique: élastique, viscoélastique, visqueux, plastique ...

Nous allons donc dans la suite de ce chapitre envisager les comportements mécaniques des matériaux les plus fréquemment utilisés en microélectronique. Ceci nous amènera à passer en revue les différents modèles rhéologiques développés dans ce travail.

#### IV-2 Cas des Déformations Élastiques

Envisageons dans un premier temps le comportement de type élastique. Ce comportement correspond bien aux propriétés mécaniques du silicium, en dessous d'un certain niveau de seuil de contraintes, comme cela sera précisé plus loin.

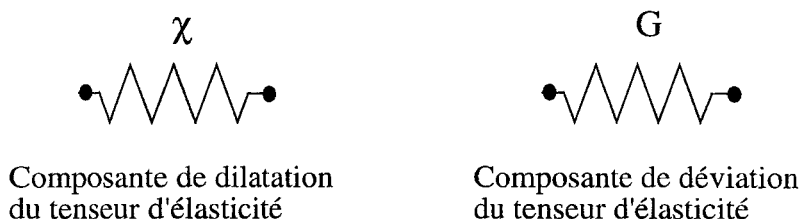
On appelle déformation élastique une déformation réversible. Elle est caractérisée le plus souvent par une relation linéaire entre les contraintes et les déformations (loi de Hooke); une déformation appliquée donnant lieu à une contrainte qui lui est proportionnelle; lorsque la sollicitation est retirée, la contrainte disparaît.

Lorsque cette relation linéaire s'applique à la fois aux composantes de dilatation et de déviation, on a à faire à un solide élastique. La relation de Hooke s'écrit :

$$[\sigma] = [\chi] \cdot [\varepsilon] \quad \text{et} \quad [\sigma] = [G] \cdot [\varepsilon] \quad (\text{IV.13})$$

où  $\chi$  et  $G$  sont respectivement les modules de compressibilité et de rigidité du matériau.

Le modèle analogique correspondant est constitué, pour chaque composante, d'un ressort de module  $\chi$  pour la compressibilité et  $G$  pour la rigidité :



**Figure IV-1:** Modèles analogiques du comportement rhéologique correspondant au solide élastique.  $\chi$ ,  $G$  sont respectivement les modules de compressibilité et de rigidité du matériau.

Ces propriétés mécaniques ont été détaillées au chapitre précédent.

La formulation matricielle de l'équation de Hooke (IV.13) s'écrit dans le cas d'un système bidimensionnel et avec l'approximation des déformations planes :



$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \frac{E \cdot (1 - \nu)}{(1 + \nu) \cdot (1 - 2\nu)} \begin{bmatrix} 1 & \frac{\nu}{1 - \nu} & 0 \\ \frac{\nu}{1 - \nu} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1 - 2\nu}{2(1 - \nu)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.14})$$

où E est le module d'Young,  $\nu$  le coefficient de Poisson.

La matrice  $[D]$  recherchée correspond donc à

$$\frac{E \cdot (1 - \nu)}{(1 + \nu) \cdot (1 - 2\nu)} \begin{bmatrix} 1 & \frac{\nu}{1 - \nu} & 0 \\ \frac{\nu}{1 - \nu} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1 - 2\nu}{2(1 - \nu)} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.15})$$

### IV-3 Cas des Déformations Viscoélastiques

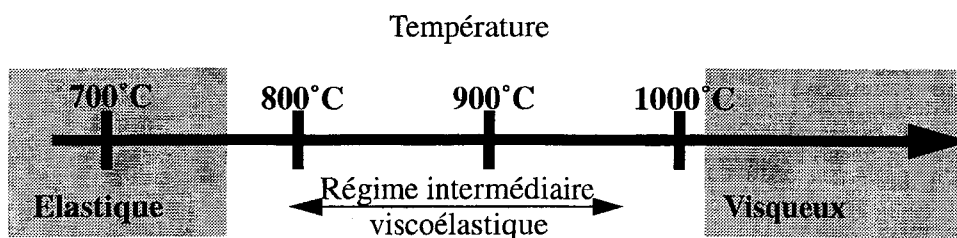
Certains matériaux mis en oeuvre dans les procédés technologiques de la filière silicium, tels que l'oxyde et le nitrure de silicium, exhibent des caractéristiques élastiques sous un état de contraintes hydrostatiques et possèdent une tendance à l'écoulement sous un état de contraintes en déviation [3]. En terme de modèles rhéologiques, ils se comportent comme des liquides. Par conséquent, les solides de Hooke et Kelvin-Voigt ne sont pas indiqués pour la modélisation de leur comportement. Deux modélisations sont donc envisageables : le liquide de Newton ou celui de Maxwell.

Le fluide de Maxwell a la propriété de garder en mémoire l'historique des états de contrainte qu'il a subi. La modélisation de ce type de comportement prend en compte avec exactitude le temps de relaxation des contraintes.

Au contraire, le liquide de Newton relaxe instantanément toutes les contraintes et la réponse de ce corps à une sollicitation ne dépend que de la vitesse de déformation instantanée. Comme le temps de relaxation des contraintes est proportionnel à la viscosité du matériau, le comportement de Newton n'est valable que pour la modélisation de matériaux à faible viscosité.

Nous avons vu au chapitre précédent que l'oxyde de silicium soumis à un état de contraintes en déviation se comporte de manière viscoélastique, en présentant un écoulement [4]. L'amplitude de cet écoulement est fonction de la température. A haute température, les déformations sont visqueuses [5] ( $> 975^\circ\text{C}$ ), alors que, à température basse, il est plutôt de type élastique. Entre ces deux températures, ce matériau présente un régime intermédiaire

entre la viscosité et l'élasticité (figure IV-2).

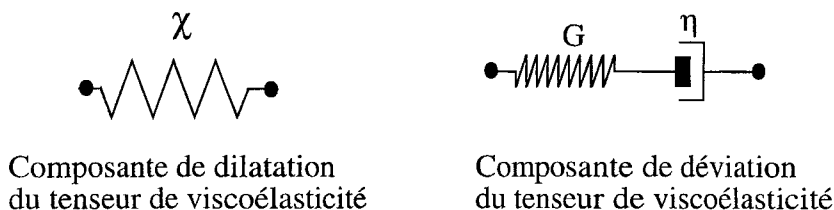


**Figure IV-2:** Comportement mécaniques en déviation de l'oxyde de silicium en fonction de la température [5].

La modélisation de l'oxyde de silicium est donc du type fluide de Maxwell, et présente un régime viscoélastique. La composante de dilatation liant les tenseurs contraintes et déformations est régie par la loi de Hooke (relation  $\sigma/\epsilon$  linéaire), alors que celle de déviation est régie par une loi de Maxwell.

Cette modélisation est également choisie dans notre travail pour traiter les propriétés mécaniques du nitrure de silicium. Ce dernier a en effet un comportement similaire à l'oxyde et sera également considéré comme un liquide de Maxwell.

La figure IV-3 illustre les modèles adoptés pour les composantes de dilatation et déviation:



**Figure IV-3:** Modèles analogiques du comportement rhéologique correspondant au liquide de Maxwell.  $\chi$ , G et  $\eta$  sont respectivement les modules de compressibilité, de rigidité et la viscosité du matériau.

La modélisation de Maxwell des propriétés fluidiques a été abordée avec un formalisme simplifié, analogue à celui de l'élasticité, en faisant apparaître un coefficient de rigidité effective. En effet, le déviateur des contraintes dans le cas de l'élément de Maxwell vérifie l'expression suivante:

$$\dot{\epsilon}^s - \left( \frac{\dot{\sigma}^s}{G} + \frac{\sigma^s}{\eta} \right) = 0 \tag{IV.16}$$

où  $\eta$  est la viscosité et G est le coefficient de rigidité.

Nous allons résoudre cette équation (IV.16) dans le cas où nous imposons une vitesse de déformation constante ( $\dot{\epsilon} = cste$ ) à l'échantillon. Ceci est une approximation valide dans des intervalles de temps  $\Delta T$  suffisamment petits [6]. Nous décomposons donc le temps en intervalles tels que  $t_{n+1} - t_n = \Delta T$  pendant lesquels nous effectuons l'intégration. Alors

$$\dot{\epsilon} = \frac{\epsilon(t_{n+1}) - \epsilon(t_n)}{t_{n+1} - t_n}.$$

La résolution de (IV.16) donne :

$$\sigma(t_{n+1}) = \sigma(t_n) \cdot \exp\left(-\frac{t_{n+1} - t_n}{\tau_R(t_n)}\right) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} G \cdot \exp\left(-\frac{t_n - \tau}{\tau_R(t_n)}\right) \cdot \dot{\epsilon} \cdot d\tau \quad (IV.17)$$

avec  $\tau_R(t_n) = \frac{\eta(t_n)}{G}$ , la constante de temps de relaxation caractéristique,  $\tau_R(t_n)$  est constante dans l'intervalle de temps  $[t_n, t_{n+1}]$ .  $\sigma(t_n)$  est la pré-contrainte existante au temps  $t_n$ .

L'équation (IV.17) devient alors :

$$\sigma(t_{n+1}) = \sigma(t_n) \cdot \exp\left(-\frac{t_{n+1} - t_n}{\tau_R(t_n)}\right) + G \frac{\epsilon(t_{n+1}) - \epsilon(t_n)}{(t_{n+1} - t_n)} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \exp\left(-\frac{t_n - \tau}{\tau_R(t_n)}\right) \cdot d\tau \quad (IV.18)$$

$$\sigma(t_{n+1}) = \sigma(t_n) \cdot \exp\left(-\frac{t_{n+1} - t_n}{\tau_R(t_n)}\right) + G \frac{\tau_R(t_n)}{\Delta T} \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta T}{\tau_R(t_n)}\right)\right) \Delta \epsilon \quad (IV.19)$$

$$\sigma(t_{n+1}) = \sigma(t_n) \cdot \exp\left(-\frac{t_{n+1} - t_n}{\tau_R(t_n)}\right) + G_{eff} \Delta \epsilon \quad (IV.20)$$

$$\text{avec } G_{eff} = G \cdot \frac{\tau_R(t_n)}{\Delta T} \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta T}{\tau_R(t_n)}\right)\right) \quad (IV.21)$$

Le premier terme du membre de droite de l'équation (IV.20) exprime la contrainte induite par l'élément de déformation imposé dans le pas de temps  $\Delta T$  considéré. Cette contrainte est linéairement dépendante de la déformation avec l'hypothèse formulée ci-dessus ( $\Delta T$  très petit). L'expression matricielle de cette composante de la contrainte s'obtiendra de la même manière que dans le cas de la relation élastique avec une matrice  $[D]_{eff}$ .

Le deuxième terme du membre de droite de l'équation (IV.20) traduit la capacité physique de l'élément de Maxwell à relaxer les contraintes. En effet, la contrainte initiale au pas de temps considéré est relaxée d'un coefficient  $\exp(-\Delta T/\tau_R(t_n))$ .

Cette dernière relation montre donc bien que la visco-élasticité introduite par le modèle de Maxwell peut être modélisée par une rigidité effective,  $G_{eff}$ , dans le terme de dévia-

tion des contraintes. Le formalisme développé dans le paragraphe précédent peut donc être facilement appliqué.

### IV.3.1-Continuité du Modèle Viscoélastique

Ce formalisme permet de retrouver les comportements mécaniques “classiques” en fonction de la température.

En effet, lorsque la température est basse ( $T^0 < 800^\circ\text{C}$ ), alors le coefficient de viscosité  $\eta$  est très grand, donc le temps de relaxation  $\tau_R(t_n)$  est grand.

$$\text{D'où: } G_{eff} \approx \frac{\eta}{\Delta T} \cdot \left( 1 - \left( 1 - \frac{\Delta T}{\tau_R(t_n)} \right) \right) \approx \frac{\eta}{\tau_R(t_n)} \approx G \quad (\text{IV.22})$$

On retrouve le comportement purement élastique.

Au contraire, si la température est élevée ( $T > 1050^\circ\text{C}$ ), alors  $\eta$  est petit, Il en est de même pour le temps de relaxation. D'où

$$G_{eff} \approx \frac{G\tau_R(t_n)}{\Delta T} = \frac{\eta}{\Delta T} < G \quad (\text{IV.23})$$

Or, comme le module de compressibilité  $\chi$  est du même ordre que  $G$ , la relation (IV.23) indique que le rapport  $G_{eff}/\chi$  tend vers zéro, ce qui, dans le formalisme de l'élasticité se traduit par une condition d'incompressibilité ( $\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} = 0$ ). Avec ces deux hypothèses, l'équation (IV.14) s'écrit alors :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \left( \chi \times \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \frac{\eta}{\Delta T} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{xy} \end{bmatrix} \quad (\text{IV.24})$$

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

De plus si  $\Delta T$  est petit, alors:

$$\frac{\epsilon_{xx}}{\Delta T} = \frac{\partial}{\partial x} U_{xx}, \quad \frac{\epsilon_{yy}}{\Delta T} = \frac{\partial}{\partial y} U_{yy} \quad \text{et} \quad \frac{\epsilon_{xy}}{\Delta T} = \frac{\partial U_{xx}}{\partial y} + \frac{\partial U_{yy}}{\partial x} \quad (\text{IV.25})$$

$U_{xx}$  et  $U_{yy}$  étant les composantes suivant  $x$  et  $y$  du vecteur déplacement.

L'équation (IV.24) devient alors :

$$\sigma_{xx} = -p + 2\eta \frac{\partial U_{xx}}{\partial x} \quad (IV.26)$$

$$\sigma_{yy} = -p + 2\eta \frac{\partial U_{yy}}{\partial y} \quad (IV.27)$$

$$\sigma_{xy} = \eta \left( \frac{\partial U_{xx}}{\partial y} + \frac{\partial U_{yy}}{\partial x} \right) \quad (IV.28)$$

Utilisant les équations d'équilibre (III.11) et (III.12), on retrouve les équations de Navier-Stokes valables pour les liquides incompressibles :

$$0 = \eta \left( \frac{\partial^2 U_{xx}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U_{xx}}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial p}{\partial x} \quad (IV.29)$$

$$0 = \eta \left( \frac{\partial^2 U_{yy}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U_{yy}}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial p}{\partial y} \quad (IV.30)$$

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

### *IV.3.2-Effet des Contraintes sur la Viscosité*

Pour compléter cette modélisation rhéologique, il est nécessaire de se rappeler que les mesures de viscosité de la silice en volume [7] donnent des valeurs très élevées même à haute température ( $\sim 10^{18}$  Poises à 1000°C). Ainsi, au cours d'une étape d'oxydation du silicium d'une structure tranchée, par exemple dans une technologie DRAM, si l'on considère que la viscosité ne varie qu'en fonction de la température, de la teneur en radicaux -OH dans l'oxyde [8] et du pourcentage de composants halogénés dans le gaz oxydant [9], les niveaux de contraintes générales autour des coins des tranchées devraient provoquer des dislocations du silicium, étant donné le temps de relaxation gigantesque qu'il leur faudrait pour revenir à un niveau raisonnable. Or, tout au contraire, on observe des déformations très importantes de l'oxyde à ces coins et aucune dislocation dans le substrat [10]. Ceci suggère que la viscosité diminue au fur et à mesure que les contraintes dans l'oxyde augmentent. En d'autres termes, l'écoulement de l'oxyde ne se fait pas à viscosité constante - viscosité de type Newtonienne. La silice est un matériau non linéaire, dont la viscosité dépend de l'état de contrainte résiduelle dans le corps.

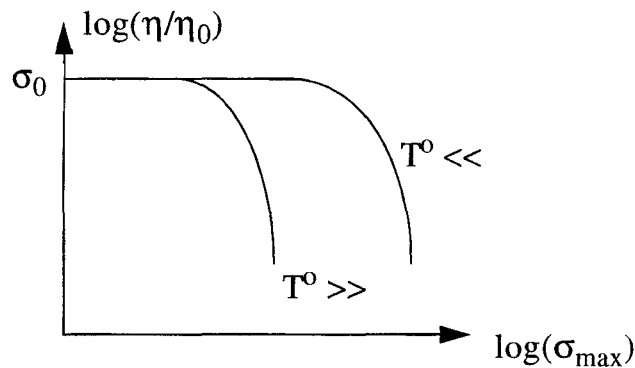
Il existe différents types d'écoulements non-linéaires suivant que la viscosité augmente ou diminue avec la vitesse de déformation. On parle dans le premier cas d'un écou-

lement épaississant et dans le second d'un écoulement fluidifiant [11].

Dans le cas du dioxyde de silicium, la modélisation d'Eyring, fluidifiante, est la plus appropriée [12]. Elle s'exprime par la relation:

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

où  $\eta_0$  est la viscosité de l'oxyde à faible niveau de contraintes;  $\sigma_{max}$  est la contrainte de cisaillement maximale et  $\sigma_0$  est une valeur critique du cisaillement au-delà de laquelle le matériau perd son caractère linéaire. Ce seuil est fonction de la température : plus la température est élevée, plus ce seuil est bas :



**Figure IV-4:** Variation de la viscosité en fonction des contraintes de cisaillement pour le modèle de Eyring.

$\eta$  est caractéristique de l'état de contrainte, cependant, dans un intervalle de temps  $t_{n+1}-t_n$  élémentaire, nous pouvons le considérer constant.

D'après la théorie d'Eyring,  $\sigma_0$  correspond au travail nécessaire que doivent fournir les contraintes de cisaillement pour rompre les liaisons du matériau :

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

avec  $K$  la constante de Boltzmann,  $T$  la température et  $V_c$  le volume unitaire d'activation dans lequel ont lieu les réarrangements atomiques sous contraintes. Mais des expériences [13] ont montré qu'il était nécessaire d'utiliser  $V_c$  comme un paramètre d'ajustement pour obtenir de bons accords.

### Remarque

On peut comparer ce comportement non-linéaire au comportement élastoplastique pour lequel, tant que le déviateur du tenseur des contraintes (exprimé en terme de con-

trainte de cisaillement maximale ou de contrainte octaédrique) est inférieur à une certaine valeur caractéristique du matériau, le matériau est purement élastique. Au delà, il subit des déformations plastiques irréversibles (critères de Tresca ou Von Mises). C'est pourquoi on a l'habitude d'appeler  $V_c$  : volume d'activation de la plasticité. De même, lorsque  $\sigma_{\max} > \sigma_0$ , on dira que l'oxyde entre en régime plastique.

#### IV-4 Déformations Plastiques du Silicium.

Le silicium monocristallin est un matériau dont le comportement mécanique s'apparente dans un premier temps à un comportement élastique: les contraintes sont linéairement dépendantes de la déformation imposée. Ces dernières sont réversibles. Cependant, une analyse plus fine fait apparaître un niveau de contrainte maximal à partir duquel des déformations irréversibles apparaissent. Cette contrainte limite pour laquelle le régime élastique ne s'applique plus est appelé seuil d'élasticité. Au delà de ce seuil de contrainte, le matériau entre dans un régime plastique. Patel a étudié ces propriétés plastiques du silicium et a mesuré le seuil de contraintes à partir duquel le régime plastique est activé [14]. Différents critères peuvent être utilisés pour quantifier le dépassement de la limite d'élasticité, tels que les critères de Von Mises ou Tresca, comme cela a été vu au chapitre 3.

L'apparition de déformations plastiques dans le silicium va suivre des mécanismes bien précis, suivant que le matériau est soumis à une pression uniforme ou non. Envisageons tout d'abord le cas où le silicium est soumis à une pression uniforme. Cette pression uniforme va provoquer une réduction de volume de l'échantillon, qui correspondra d'une part à une réduction de la distance interatomique, et d'autre part à une génération d'interstitiels ou une capture de lacunes. La réduction des distances interatomiques est élastique puisque lorsque la charge est supprimée, la distance interatomique revient à sa valeur initiale d'équilibre. La déformation est donc réversible. La génération d'interstitiels et la capture de lacunes correspondent elles à une déformation plastique. A l'équilibre, la concentration des défauts ponctuels correspond donc à la concentration d'interstitiels  $I$  et à la concentration de lacunes capturées  $V$ :

$$I = I_0 \exp\left(\frac{P\Delta V_I}{kT}\right) \quad (\text{IV.33})$$

$$V = V_0 \exp\left(-\frac{P\Delta V_V}{kT}\right) \quad (\text{IV.34})$$

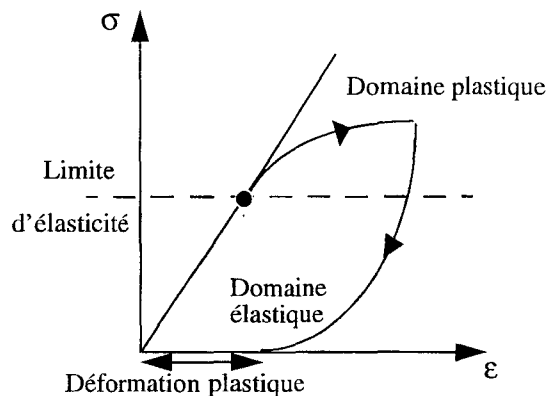
où  $P$  est la pression appliquée,  $\Delta V_I$  et  $\Delta V_V$  sont les volumes de déformation des défauts. Or expérimentalement,  $\Delta V_I \approx \Delta V_V \approx 0.5 \cdot \text{volume atomique} \approx 10^{-23} \text{ cm}^3$ .  $I_0$  et  $V_0$  sont les concentrations initiales en défauts, respectivement en interstitiels et en lacunes.

Dans le cas du silicium, tant que la température est inférieure à  $1200 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $I_0 < 10^{14}$  et  $V_0 < 10^{14}$ . Si on considère une pression uniforme appliquée à un volume élémentaire,

on peut démontrer que la déformation plastique due à une variation de défauts étendus sera nettement négligeable devant la contribution élastique correspondant à la réduction des distances interatomiques. Un calcul rapide avec une pression de 200 MPa uniforme appliquée à un volume élémentaire de silicium de  $1 \text{ cm}^3$  montre un facteur  $10^7$  entre les deux contributions [15].

La génération d'interstitiels et la capture de lacunes est un phénomène réversible, caractérisé par une constante de temps  $\tau$  d'émission et de capture, qui traduit un retard à l'émission et à la capture. Ce comportement peut-être caractérisé par un modèle de Kelvin-Voigt. Cependant, nous venons de préciser que sous pression uniforme, cette composante plastique de la déformation est négligeable devant la composante élastique. Considérons maintenant le cas où l'échantillon de silicium est soumis à une pression non-uniforme. Cette différence de pression va donc créer un flux de matière. Nous devons envisager deux cas: tout d'abord le cas d'un gradient de pression hydrostatique. Ce gradient va donner naissance à un flux de défauts ponctuels tel que par exemple un flux d'interstitiels des zones en pression vers les zones en tension. Ensuite, nous pouvons avoir un gradient de contraintes de cisaillement. Dans ce cas, si la contrainte de cisaillement résolue dépasse la limite d'élasticité, nous verrons apparaître des glissements de dislocations. Le critère de Von Mises est le critère le plus souvent utilisé pour déterminer s'il y a dépassement du seuil d'élasticité caractéristique du matériau. Ces glissements de dislocations sont irréversibles: il faut inverser la contrainte pour faire naître le flux inverse. D'autre part, ils nécessitent la mise en jeu de contraintes assez élevées. En résumé, dans le cas de pression non-uniforme, la déformation correspondra à un flux de défauts ponctuels et/ou à un flux de dislocations lorsque la contrainte aura dépassé un certain seuil.

La formulation générale de la contrainte en fonction de la déformation est donnée par la Figure IV-5:



**Figure IV-5:** Loi de comportement élasto-plastique pour le silicium.

L'apparition de déformations irréversibles dans le silicium va avoir des conséquences critiques, telles que l'apparition et la propagation de défauts cristallins. Dans un échantillon de cristal sans défauts, tels que les substrats considérés au départ de nos simulations, les déformations plastiques irréversibles donneront naissance à des dislocations du réseau cristallin [16], lesquelles permettent la relaxation des contraintes plastiques. De même,



dans un échantillon contenant déjà des dislocations, l'apport de nouvelles déformations plastiques se traduira par une propagation de ces boucles de dislocations et par leur multiplication [16].

Au delà des défauts cristallins, l'apparition de zones plastiques dans le silicium, dans lesquelles un niveau de contrainte résiduel subsiste même lors du retrait de la charge, modifiera certaines propriétés physiques et électriques du matériau. Ainsi, le mécanisme d'oxydation du silicium qui est dépendant de l'état de contrainte résiduel dans le matériau sera modifié : les coefficients de réaction à l'interface Si/SiO<sub>2</sub> sont diminués par la présence de contraintes de compression. En pratique, cette réduction de la vitesse d'oxydation peut être observée sur des structures microscopiques sur lesquelles on fait croître un oxyde très fin (oxyde de grille de 80 à 100 ang. par exemple). Cela se traduit par un amincissement de l'épaisseur finale de la couche d'oxyde (phénomène dit de «gate thinning»). Ce cas sera traité plus en détail dans la partie présentant des applications de notre travail.

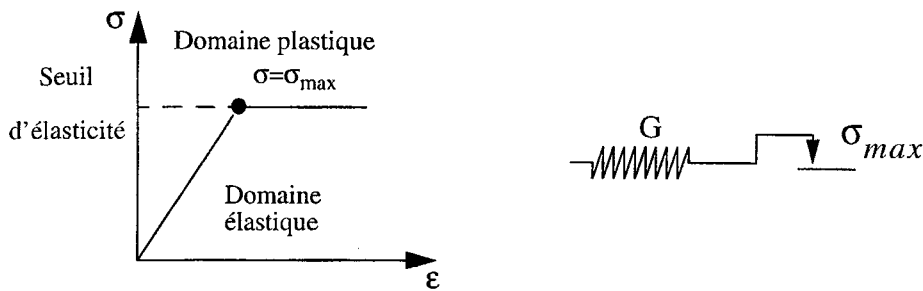
Par conséquent, la modélisation fine des propriétés mécaniques du silicium doit prendre en compte le comportement plastique et ne pas se limiter seulement au comportement élastique, comme cela a été fait jusqu'ici dans la plupart des travaux précédents [17][18].

De nombreux travaux, liés à l'étude des contraintes dans des structures mécaniques en dehors du domaine de la microélectronique, se sont intéressés à la modélisation élément finis du comportement plastique. Ainsi, Zienkiewicz a proposé une formulation générale de la matrice élasto-plastique, permettant de calculer l'évolution des contraintes plastiques, selon différents critères (critère de Von Mises, de Coulomb-Drucker) [19]. Des exemples sont traités par Zienkiewicz, sur des structures simples dans le cas des approximations de déformations ou de contraintes planes.

D'autres approches sont proposées dans la littérature: une formulation basée sur l'hypothèse de "déformation initiale", dans laquelle pour chaque incrément de charge, la distribution de la composante élastique de la contrainte est ajustée [20], [21], ou encore la méthode qui consiste à ajuster la relation contrainte/déformation à chaque pas de temps du calcul, de manière à prendre en compte la déformation plastique [22], [23], [24], [25]. Zienkiewicz a fait un résumé des ces différentes méthodes [19].

Dans notre travail, nous avons modélisé le comportement élastoplastique décrit plus haut de manière simplifiée, en cherchant en premier lieu à rendre compte de la saturation des contraintes au delà de la limite d'élasticité. Ainsi, un comportement élastique puis bloqué au delà du seuil nous permet d'approcher de manière simple l'évolution générale de la contrainte en fonction de la déformation. Ceci nous évite de devoir mettre en place un formalisme complet d'élastoplasticité nettement plus complexe, tel que celui développé par Zienkiewicz. La figure IV-6 montre le modèle simplifié adopté dans ce travail pour rendre compte du comportement élasto-plastique du silicium.

Ce modèle est appliqué à la composante de dilatation du tenseur des contraintes. La composante en déviation reste elle purement élastique. Ainsi, le comportement élastoplastique est dans notre travail envisagé uniquement dans le cas où un gradient de pression est appliqué à l'échantillon. Cette modélisation est restrictive puisqu'elle ne permet pas de traiter le cas des contraintes de cisaillement résolue donnant lieu à des dislocations. Elle ne nous permettra de traiter que les déformations plastiques nées des flux de défauts ponctuels.



**Figure IV-6:** Modèle simplifié d'élasto-plasticité adopté pour le silicium.

Ce choix a été effectué car dans le domaine de la microélectronique, l'apparition de dislocations dans le silicium provoque directement une défaillance du circuit, due à des courants de fuite trop élevés dans le substrat. Ainsi, même dans des circuits fonctionnels, il est important d'évaluer les déformations plastiques et notamment celles dues aux flux de défauts ponctuels.

Il faut également noter que ce choix est fait de façon à pouvoir illustrer la capacité du modèle à reproduire le comportement plastique. Notre choix comme illustration du modèle n'est nullement restrictif. Il est très aisé d'appliquer notre modélisation élastique bloqué à la composante de déviation, et ainsi de calculer la contrainte de cisaillement résolue dans un plan donné,  $\langle 111 \rangle$  par exemple, suivant une direction donnée,  $\langle 110 \rangle$  par exemple. En la comparant à la limite de l'élasticité en cisaillement, nous pourrions ainsi déterminer les zones où des boucles de dislocations risquent d'apparaître et de se propager. Ceci pourra faire l'objet de développements futurs.

Notre élément élasto-plastique modélise bien un solide puisque ni la composante de dilatation, ni celle de déviation ne peuvent se relaxer. Un tel modèle permet de reproduire les propriétés mécaniques d'un corps qui présente une déformation retardée, lorsqu'un état de charge est appliqué ou supprimé. Ainsi, dans le comportement élasto-plastique que nous considérons, la composante de dilatation est régie par l'équation suivante:

$$\sigma - \chi \varepsilon = 0 \quad \text{si } |\tilde{\sigma}| < Y \quad (\text{IV.35})$$

$$\sigma = \sigma_{\max} \quad \text{si } \sigma \geq Y \quad (\text{IV.36})$$

où  $\sigma$  et  $\varepsilon$  sont respectivement les tenseurs de contraintes et de déformation.  $\chi$  est le module de compressibilité.  $|\tilde{\sigma}|$  correspond à la contrainte de comparaison, définie suivant le critère de plasticité choisi et  $Y$  est le seuil d'élasticité expérimental pour le silicium.

On constate qu'au delà du seuil d'élasticité, la déformation de l'élément plastique devient indéterminé. Elle n'est plus fonction de la contrainte qui reste maximale. La suppression de la charge permettra de revenir à une déformation élastique lorsque la contrainte dans l'élément sera de nouveau descendue sous le seuil. On reproduit ainsi bien le comportement élasto-plastique du silicium tel que défini par la figure IV-5 avec une approche simple.

Cependant, dans la plupart des cas d'études mentionnés dans ce rapport, le silicium sera modélisé de manière purement élastique, afin de réduire les temps de simulation. On s'aperçoit en effet que ce modèle élastique constitue un bon compromis entre précision du résultat et temps de calcul. Par défaut on donnera donc une valeur grande au seuil d'élasticité.

#### IV-5 Algorithmes de Calcul

Compte tenu des modèles viscoélastiques du type de Maxwell, l'histoire des contraintes doit être conservée. Il est donc également nécessaire d'accumuler les contraintes résiduelles présentes à chaque fin de pas de temps. L'expression des contraintes à la fin d'un pas de temps ( $n$ ) est donné par la somme :

1- des contraintes générées durant le pas de temps courant, dues à la déformation ( $\varepsilon$ ). Cette déformation est soit issue d'une charge nouvellement appliquée au système, soit issue des déformations retardées des ( $n-1$ ) pas de temps précédents.

2- du résidu de contrainte des ( $n-1$ ) étapes précédentes.

Ceci correspond à l'équation (IV.37) pour la partie de dilatation et à l'équation (IV.38) pour la composante de déviation.

$$\sigma(n)^v = \chi \varepsilon^v + \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i^v \quad (IV.37)$$

$$\sigma(n)^s = G_{eff} \varepsilon^s + \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i^s e^{-i \left( \frac{\Delta t}{\tau_q} \right)} \quad (IV.38)$$

$\tau_q$  est la constante de temps de relaxation des contraintes suivant le modèle de Maxwell.

Cette constante de temps est prise très grande sauf pour les éléments appartenants à des matériaux viscoélastiques de Maxwell (oxydes de silicium et nitrure dans notre cas.)

Ces relations montrent que seules les contraintes de déviation se relaxent, les contraintes de dilatation purement élastiques s'additionnent.

## IV-6 Le maillage

L'utilisation de la structure du simulateur IMPACT-4 comme base des développements mécaniques réalisés au cours de ce travail présente l'avantage de pouvoir manipuler des géométries complexes et d'intégrer l'ensemble des étapes élémentaires importantes du procédé.

Les modèles nécessitent de résoudre plusieurs équations différentielles couplées, sur des structures quelconques. La méthode des éléments finis se prête parfaitement à ce genre de calculs. Elle possède le grand avantage de pouvoir traiter des géométries quelconques, comme le prouvent les nombreux développements réalisés pour des applications mécaniques traditionnelles 2D et 3D, en mécanique des structures. Nous avons donc fait le choix d'utiliser cette méthode des éléments finis.

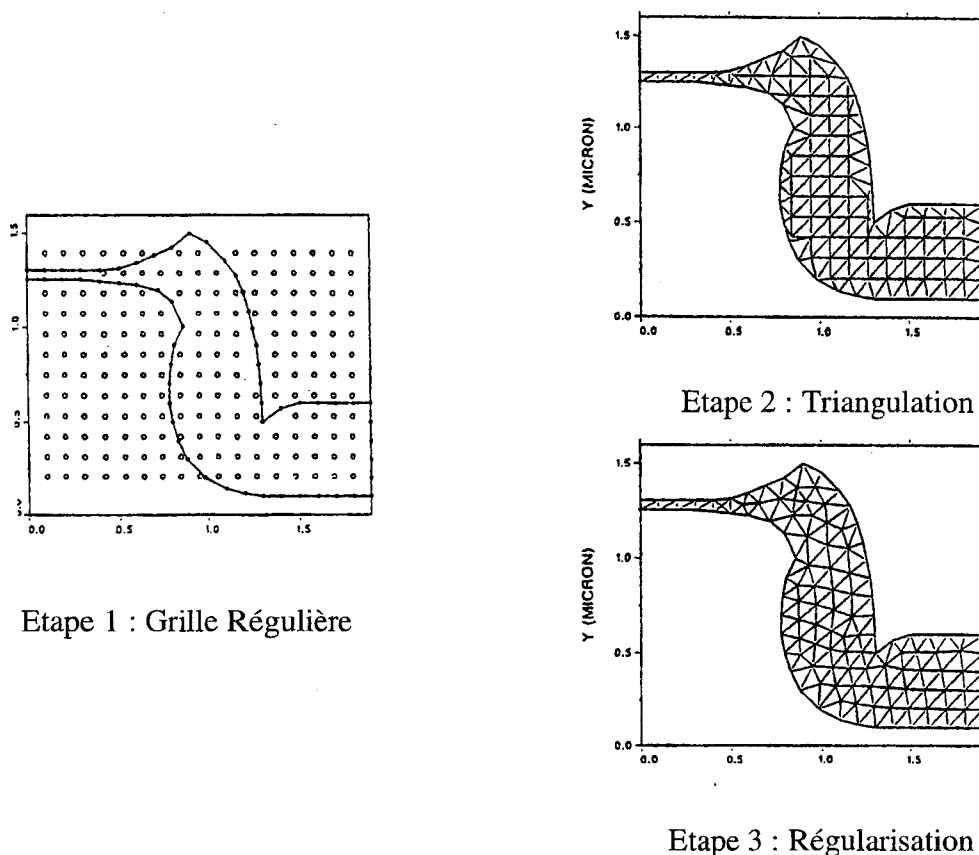
Cependant, pour obtenir une précision suffisante sur la géométrie des structures étudiées, il est nécessaire d'utiliser un pas de maillage très fin. De plus, la manipulation des structures multicouches, aux topographies complexes complique beaucoup la gestion du maillage. Ce problème de maillage est particulièrement sensible lors de traitement de l'oxydation, pendant laquelle l'expansion volumique de l'oxyde et la déformation des matériaux formant le masque entraînent une modification importante de la géométrie de la structure.

Une technique consiste à conserver le maillage initial et à le déformer pour suivre au mieux la nouvelle géométrie. Si nécessaire, des noeuds sont ajoutés sur les nouvelles frontières du domaine de simulation [26][27]. Cette solution conduit à des maillages contenant beaucoup trop d'éléments, bien souvent distordus qui entraînent des temps de calcul prohibitifs et détériorent l'exactitude de la solution. La seconde méthode est basée sur un remaillage systématique de la structure dès que sa géométrie est modifiée. Elle nécessite de mettre au point des algorithmes complexes d'interpolation des contraintes. C'est pourtant cette deuxième solution qui a été choisie, parce qu'elle permet d'obtenir des temps de calcul raisonnables et une bonne précision de calcul.

Afin de réduire au maximum les temps de calculs, il est important d'utiliser des éléments simples, dans la formulation en éléments finis. Des éléments triangulaires à 3 noeuds ayant des fonctions de formes linéaires (éléments triangulaire P1) sont donc utilisés.

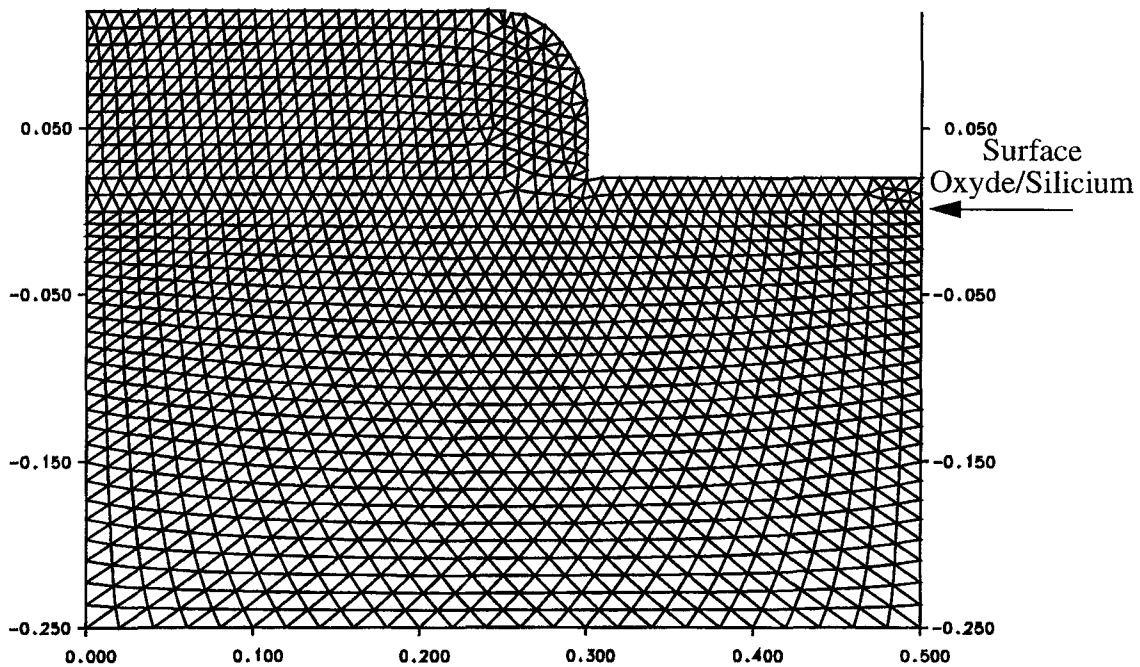
Dans le simulateur de technologie IMPACT-4 [28], chaque matériau est défini géométriquement par une enveloppe, résultat du calcul de la topographie. Cette enveloppe est déterminée par une suite de points ("string model") dont l'espacement est quasi-constant, égal au pas de référence du maillage. A partir de ces points, qui seront également des noeuds du maillage "éléments finis", la triangulation est réalisée en trois étapes comme l'illustre la figure IV-7. La première étape consiste à superposer une grille régulière de points aux points définissant l'enveloppe de la structure. Pour obtenir un maillage régulier, le pas de grille est pris égal à la distance moyenne séparant ces points de l'enveloppe. Les points trop proches de l'enveloppe sont éliminés. Une triangulation est ensuite générée, basée sur le critère de Delaunay, qui permet de minimiser les angles obtus. Cette opération est réalisée par le mailleur MSHPTS [29] développé à l'INRIA, qui, durant la construction de la triangulation élimine automatiquement les points extérieurs au domaine. Le résultat de la triangulation est donné à la figure IV-7.

Enfin, une régularisation de maillage est systématiquement effectuée pour améliorer encore les formes des éléments triangulaires. Les noeuds intérieurs sont déplacés vers la position du barycentre de leurs premiers voisins. Cette procédure est menée de manière itérative jusqu'à l'obtention de la convergence sur l'ensemble des coordonnées.



**Figure IV-7:** Etapes systématiques permettant le maillage d'un domaine dans IMPACT-4 : a) une grille de points est superposée aux noeuds définissant l'enveloppe du domaine, b) la triangulation est effectuée avec le critère de Delaunay, c) une procédure itérative de régularisation est appliquée aux coordonnées des noeuds intérieurs au domaine [28].

La figure IV-8 donne un exemple complet de maillage d'une structure MOSFET LDD. Cet exemple comprend 1517 noeuds et 2707 éléments. Durant la simulation, dès que l'enveloppe d'un domaine est modifiée par une étape (dépôt, gravure, oxydation), son maillage est systématiquement régénéré et les informations sur les contraintes y sont interpolées.



**Figure IV-8:** Exemple de maillage d'une structure MOSFET de type LDD. La précision du calcul numérique est assurée par la finesse de la discrétisation spatiale et par le remaillage systématique de la structure après chaque étape modifiant la topographie.

On peut noter que comme les domaines sont traités séparément, les noeuds qui sont situés aux interfaces sont doubles dans la mesure où deux valeurs nodales  $y$  sont affectées. Des noeuds triples ont également été introduits pour reproduire les différentes géométries.

A une étape élémentaire de la simulation correspond un maillage unique utilisé pour l'ensemble des calculs nécessaires à l'étape (diffusion des dopants, équilibre mécanique, oxydation ...)

#### IV-7 La Résolution Numérique

Les équations différentielles régissant l'équilibre mécanique dans la structure sont résolues à l'aide d'une discrétisation spatiale, par la méthode des éléments finis avec, comme cela a été justifié plus haut, des éléments triangulaires P1. L'assemblage "élément fini" est basé sur la technique des résidus pondérés et la méthode de Galerkin [30]. Le système linéaire qui en résulte est résolu par une méthode de Gauss directe. Un algorithme de minimisation de la largeur de bande et du profil du système linéaire a été implanté afin de réduire les temps de calcul [31].

Le calcul mécanique général nécessite de déterminer les contraintes issues de l'étape d'oxydation thermique du silicium, ce qui se fait en modélisant la réaction d'oxydation. La simulation 2D de l'oxydation nécessite:

- la résolution d'une équation de Laplace à coefficients non-constants, qui permet le calcul des concentrations des agents oxydants dans la silice.

- la résolution des équations d'équilibre mécanique, permettant de calculer la déformation totale du système [32].

Systematiquement, les équations sont résolues de manière découplée. Les non-linéarités apparaissant dans les équations d'équilibre mécanique (équations III.11 et III.12) sont introduites de manière self-consistante par une procédure itérative permettant la convergence globale du calcul. Une technique de sous-relaxation met à jour les tableaux des contraintes agissant sur les paramètres non linéaires du problème :

$$\sigma_{nn}^{(k)} = (1 - \omega) \cdot \sigma_{nn}^{(k-1)} + \omega \cdot \sigma_{nn}^{(k)} \quad (IV.39)$$

$$P^{(k)} = (1 - \omega) \cdot P^{(k-1)} + \omega \cdot P^{(k)} \quad (IV.40)$$

$$\sigma_{max}^{(k)} = (1 - \omega) \cdot \sigma_{max}^{(k-1)} + \omega \cdot \sigma_{max}^{(k)} \quad (IV.41)$$

Dans ces expressions,  $\sigma_{nn}$ ,  $P$  et  $\sigma_{max}$  sont respectivement la contrainte normale à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>, la pression hydrostatique et la contrainte maximale de cisaillement;  $\omega$  est le facteur de relaxation commun aux trois contraintes, et  $k$  est le compteur de boucles. Le choix du coefficient  $\omega$  est primordial. En effet, des valeurs importantes ( $\omega=0.3$ ) aboutissent souvent à une divergence du système. Des valeurs très faibles ( $\omega=10^{-3}$ ) permettent d'obtenir une convergence, mais nécessite un nombre d'itérations trop important. C'est pourquoi nous préconisons de modifier dynamiquement les valeurs de  $\omega$  selon la qualité de la convergence du système. D'une valeur initiale arbitrairement fixée à 0.3 en début de pas de temps,  $\omega$  évolue empiriquement selon l'expression :

$$\omega = 0,3 \cdot 0,7^j \quad (IV.42)$$

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

$j = j + 1$  si:

$$\Delta\sigma_{nn}^{(k+1)} > \Delta\sigma_{nn}^{(k)} \quad (IV.43)$$

ou

$$\Delta P^{(k+1)} > \Delta P^{(k)} \quad (IV.44)$$

ou bien encore

$$\Delta\sigma_{max}^{(k+1)} > \Delta\sigma_{max}^{(k)} \quad (IV.45)$$

Les écarts de contraintes sont calculés de la manière suivante :

$$\Delta\sigma_{nn}^{(k)} = \text{Max}_{\text{noeuds}}(\sigma_{nn}^{(k)} - \sigma_{nn}^{(k-1)}) \quad (\text{IV.46})$$

$$\Delta P^{(k)} = \text{Max}_{\text{elements}}(P^{(k)} - P^{(k-1)}) \quad (\text{IV.47})$$

$$\Delta\sigma_{\text{max}}^{(k)} = \text{Max}_{\text{elements}}(\sigma_{\text{max}}^{(k)} - \sigma_{\text{max}}^{(k-1)}) \quad (\text{IV.48})$$

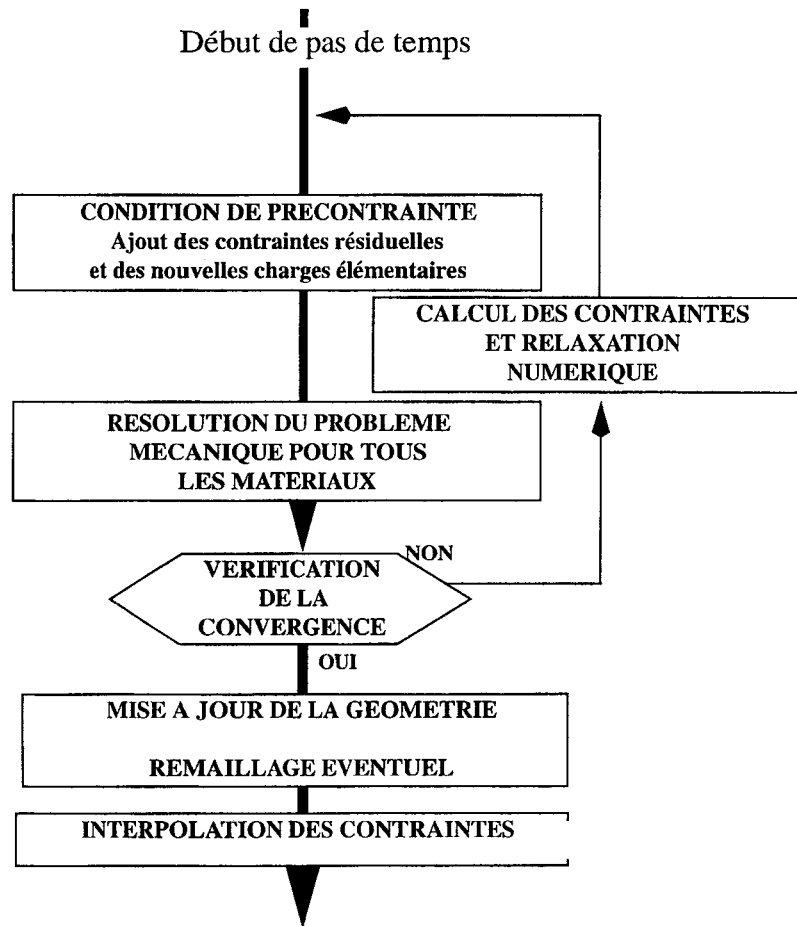
Le système est considéré convergé lorsque les déplacements incrémentaux de l'ensemble des noeuds, d'une itération à l'autre, sont inférieurs à 1% du déplacement maximal. Une fois cette convergence obtenue, les frontières des domaines sont redéfinies conformément aux déplacements calculés.

Si nécessaire, la structure est remaillée entièrement en fonction de la nouvelle enveloppe calculée avec les procédures précédentes. Les nouvelles coordonnées de l'ensemble des noeuds de la structure sont calculés et les surfaces reconstruites. Ceci fait appel à des techniques d'élimination de boucles, de suppression d'angles trop aigus et de régulation de la densité des points de discrétisation. Ces procédures font partie des possibilités de simulation des topographies multicouches offertes par IMPACT-4 et dont les détails numériques sont largement explicités par Baccus [33].

Finalement les modifications successives de la géométrie impliquent l'interpolation des contraintes et déformations de l'ancien maillage sur le nouveau. Dans un élément triangulaire P1, les fonctions de forme linéaires sont appliquées aux déformations; les déformations et contraintes résultantes sont constantes et discontinues sur l'ensemble de la structure. A l'intérieur d'un même pas de temps, les contraintes  $[\sigma_v]$  et  $[\sigma_s]$  et les déformations sont calculées et gérées par éléments. Cependant, les interpolations à partir de fonctions discontinues étant préjudiciables à une bonne stabilité numérique, nous avons choisi de sauvegarder et d'interpoler les informations par noeud durant toute la simulation, de pas de temps en pas de temps. Elles sont restaurées par éléments au début de chaque incrément de temps. Des tests systématiques prouvent que les maillages sont suffisamment denses pour que les passages successifs d'éléments à noeuds n'altèrent pas la précision numérique.

L'algorithme présenté sur la figure IV-9 résume ce schéma itératif utilisé pour le traitement des non-linéarités.





**Figure IV-9:** Algorithmes de traitement des non-linéarités liées au problème mécanique dans IMPACT-4.

## Références Bibliographiques du Chapitre 4

- [1] S. Timoshenko et J.N. Goodier, "Théorie de l'Elasticité", Eds. Polytechniques Beranger, p17, 1961.
- [2] G. Dhatt et G. Touzot, "Une présentation de la Méthode des Eléments Finis", Collection Université de Compiègne, Maloine Paris, 1981.
- [3] C.S. Rafferty, L.M. Landersberger, R.W. Dutton, W.A. Tiller, "Non-linear Viscoelastic Dilation of SiO<sub>2</sub> films", Applied Physics Letters, vol. 54, p151, 1989.
- [4] R.M. Christensen, "Theory of Viscoelasticity: an Introduction", Academic Press, New York, 1982.
- [5] E.P. Eernisse "Viscous Flow of Thermal SiO<sub>2</sub>", Applied Physics Letters, vol 30, p. 290, 1977.
- [6] J.P. Peng and G.R. Srinivasan, "Non-linear Visco-Elastic Modeling of Thermal Oxidation of SiO<sub>2</sub>", Nasecode VII Tech Dig. Eds. J.J.H. Miller, Boulders, Co USA 1991.
- [7] G. Heterington et al. "The Viscosity of Vitreous Silica", Physics and Chemistry of Gasses, vol. 5, p. 130, 1964.
- [8] S.M. Hu, "Effects of Process Parameters on Stress Development in Two-Dimensional Oxidation", J. Appl. Phys., vol. 64, p. 323, 1988.
- [9] K. Imai and Y. Yamake, "Non Planar Oxidation in Dry O<sub>2</sub>/NF<sub>3</sub>", Applied Physics Letters, vol. 56, p. 280, 1990.
- [10] J. H. Li and D.R. Uhlmann, "The Flow of Glass at High Stress Levels", Journ. of non-Cryst. Solids, vol. 3, p. 127, 1970.
- [11] B Persoz, "Introduction à l'Etude de la Rhéologie", Dunod, Paris 1960.
- [12] H. Eyring, "Viscosity, Plasticity and Diffusion as Exemples of Absolute Reaction Rates", Journ. of Chemical Physics, vol. 4, p. 283, 1936.
- [13] P. Donnadiou, O. Jaoul, M. Kleman, "Plasticité de la Silice de Part et d'Autres de la Transition Vitreuse", Philosophical Magazine, A, vol. 52, p. 5, 1985.
- [14] J.R. Patel and A. R. Chaudri, "Macroscopic Plastic Properties of Dislocation-Free Germanium and other Semiconductor Crystals. I. Yield Behaviour," J. Appl. Physics, vol. 34, pp. 2788-2799, September 1963.
- [15] B. Leroy, Discussions privées, 1999.
- [16] S. R. Stiffler et A. O. Cifuentes, "The Effect of Trench Corner Shapes on Local Stress Fields: A Three-Dimensional Finite Element Modeling Study", IEEE Transaction On Electron Devices, vol. 40, n. 3, pp. 557-563, March 1993.
- [17] A. Poncet, "Accurate Simulation of Mechanical Stresses in Silicon during Thermal Oxidation", Proceedings of SISDEP 93, vol. 5, p. 173, Sept 1993.

- [18] H. Umimoto, S. Odanaka, I Nakao, and H Esaki, "Numerical Modeling of Non Planar Oxidation Coupled with Stress Effects", IEEE Trans. on Computer Aided Design, vol. 8, n .6, p. 599, June 1989.
- [19] O. C. Zienkiewicz, S. Valliappan, and I. P. King, "Elasto-Plastic Solutions of Engineering Problems: Initial Stress Finite Element Approach", International Journal for Numerical Methods in Engineering, vol. 1, pp. 75-100, 1969.
- [20] R. H. Gallagher, J. Padlog, and P. B. Bijlard, "Stress Analysis of Heated Complex Shapes", Journal of Am. Rocket Society, vol. 32, pp. 700-707, 1962.
- [21] J. H. Argyris, "Elasto-Plastic Matrix Displacement Analysis of Three Dimensional Continua", Jl. R. Aeronaut. Society, vol. 69, pp. 633-638, 1965.
- [22] G. G. Pope, "A Discrete Element Method for Analysis of Plane Elasto-Plastic Strain Problems", R.A.F. Farnborough T.R. 65028, 1965.
- [23] S.F. Reyes and D. U. Deere, "Elasto-Plastic Analysis of Underground Openings by the Finite Element Method", in Proceedings of 1st. Inter. Congr. Rock Mechanics, 11, pp. 477-563, Lisbon, 1966.
- [24] P. V. Marcal and I. P. King, "Elasto-Plastic Analysis of two Dimensional Stress Systems by the Finite Element Method", International Journal of Mechanical Sciences, vol. 9, pp. 143-155, 1967.
- [25] Y. Yamada, N. Yoshimura and T Sakurai, "Plastic Stress-Strain Matrix and its Application for the Solution of Elastic-Plastic Problems by the Finite Element Method", International Journal of Mechanical Sciences, vol. 10, pp. 343-354, 1968.
- [26] L. Borucki, H.H. Hansen and K. Varahramian, "FEDSS, a 2D Semiconductor Fabrication Process Simulator", IBM Journ. of Res. and Develop., vol. 29, p. 263, May 1985.
- [27] M.E. Law, C.S. Rafferty, R.W. Dutton, "Suprem IV User's Manual", Stanford University, Stanford 1986.
- [28] V. Senez, B. Baccus, P. Ferreira, "IMPACT-4, v4.8 Users' Manual", Lille 1995.
- [29] F. Hecht et A Marocco, "Internal Report on MSHPTS", INRIA, Rocquencourt, Fev. 1982.
- [30] O. C. Zienkiewicz, "The Finite Element Method in Engineering Science", Mac Graw Hill, 1971.
- [31] S.W. Sloan, "A Fortran Program for Profile and Wavefront Reduction" International Journal of Numerical Methods in Engineering, vol. 28, p. 2651, 1989.
- [32] 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, Janvier 1995.
- [33] B. Baccus, "Simulation Bidimensionnelle de Technologies Silicium - L'Approche Multi-couche", Thèse présentée à l'Université des Sciences et Technologies de Lille, Mars 1990.

# Chapitre 5

---

## V- Calibration du Modèle Mécanique

*La réalisation d'un outil de simulation prédictif, permettant d'étudier les contraintes mécaniques dans une structure microélectronique repose sur une modélisation fine des phénomènes mis en jeu, mais aussi sur une calibration de ces modèles. Différents paramètres entrant dans la formulation des modèles exposés doivent être ajustés afin que le modèle puisse rendre compte des propriétés observées expérimentalement. Le caractère prédictif d'un tel outil tient alors dans le fait qu'une fois les paramètres mécaniques fixés, celui-ci est capable de donner les réponses du systèmes à différents types de sollicitations. C'est lorsqu'il est difficile ou coûteux de réaliser une série d'expériences mettant en oeuvre certaines de ces sollicitations, que l'approche de la simulation calibrée s'avère très fructueuse.*

*La difficulté de la calibration d'un modèle tient souvent dans la nécessité de mettre en place des expériences permettant d'isoler et de caractériser chaque paramètre clé. Cette tâche est d'autant plus ardue que ces paramètres à évaluer dépendent le plus souvent des conditions expérimentales initiales : température, pression, ambiance réactive ...*

*Ce chapitre expose la calibration de certaines propriétés mécaniques effectuée au cours de ce travail. Cette calibration a consisté à caractériser les matériaux élémentaires de la technologie silicium: le silicium, pris comme substrat, l'oxyde de silicium obtenu à partir de différents procédés ainsi que le nitrure de silicium, en ajustant les paramètres élastiques, viscoélastiques et plastiques de ces corps.*

Afin d'assurer le caractère prédictif de notre outil de simulation, et d'en faire un outil efficace dans une démarche d'optimisation de technologies microélectroniques, il est important de s'assurer de l'exactitude des paramètres mécaniques introduits dans les modèles. Cependant, les dimensions mises en oeuvre dans ces procédés sont telles que l'on ne peut pas appliquer directement aux matériaux utilisés les propriétés mécaniques de ces mêmes matériaux pris à des échelles beaucoup plus grandes. En d'autres termes, les propriétés volumiques de ces matériaux telles que nous les donnons la mécanique classique doivent être ajustées et vérifiées avant de pouvoir être appliquées à nos modèles, qui s'appliquent aux couches minces.

Les paramètres rhéologiques des matériaux utilisés sont classés en deux grandes familles. D'abord les paramètres considérés indépendants (au moins au premier ordre) des conditions particulières du procédé (température ...), et seulement fonction de la nature et du type de matériau. Ensuite, les paramètres qui sont eux fonction des conditions du procédé, telles que la température, pression, type de croissance, présence et concentrations en dopants ...

Ainsi, nous prendrons dans ce travail l'hypothèse que le module d'Young et le coefficient de Poisson de chaque matériau étudié sont indépendants des conditions de procédé. Cela est généralement observé expérimentalement. Cette hypothèse est largement prise dans la plupart des travaux de simulation de procédés microélectroniques [1]. De même, la dépendance des coefficients de dilatation thermique avec les conditions extérieures est généralement faible, bien qu'existante [2]. Elle est en tout cas du second ordre devant la dépendance d'autres paramètres rhéologiques, tels que la viscosité par exemple, qu'il est donc absolument nécessaire de caractériser.

La viscosité, le volume d'activation de la plasticité ainsi que le niveau de contraintes intrinsèques sont des paramètres rhéologiques fortement dépendants des conditions du procédé (température, dopage, pression ...). Il est par exemple largement démontré que le fluage est dépendant de la température et du dopage du matériau [3], [4]. De la même manière, la contrainte intrinsèque d'une couche mince varie fortement en fonction des conditions de dépôt (dépôt CVD, LPCVD, dopage) [5].

Dans ce travail, nous avons calibré les paramètres dépendants du procédé en fonction de données expérimentales publiées ou obtenues par nos partenaires industriels. La calibration s'est focalisée sur les coefficients de dilatation thermique, les viscosités et les valeurs d'activation de la plasticité pour les oxydes de type thermique ou déposés par la technique APCVD, qu'ils soient dopés ou non dopés, ainsi que pour le nitrure de silicium. Dans le cas du silicium, seul le coefficient de dilatation thermique a été calibré et le résultat se situe dans la gamme des valeurs généralement relatées dans la littérature.

Il est important de souligner que cette calibration est faite à partir de données expérimentales précises, propres à des conditions expérimentales particulières. Elle ne peut donc être généralisée, ne reflétant pas le comportement mécanique général de ces matériaux. De plus, la calibration présentée dans ce travail n'est pas exhaustive puisqu'elle n'aborde que quelques types de matériaux (oxydes thermiques, oxydes APCVD et nitrures), n'abordant pas les oxydes déposés par CVD et PECVD (tels que les PSG, BPSG) ou LPCVD (TEOS par exemple), les nitrures LPCVD ou PECVD, les métaux (sputtering de Titane, Aluminium, Tungsten par exemple). Cependant, les méthodes utilisées pour obtenir ces caractéristiques

rhéologiques peuvent être généralisées et être employées dans d'autres cas propres à un procédé. En tout état de cause, le réajustement des paramètres mécaniques du modèle aux conditions particulières du procédé à étudier est nécessaire, ou du moins la vérification de la justesse des valeurs de ces paramètres proposées par défaut. Il est illusoire de prétendre calibrer un modèle physique phénoménologique de manière définitive et absolue.

Donc, plus que les valeurs numériques obtenues dans cette partie du travail, ce qui est important de valoriser est la méthode présentée, permettant de déterminer dans le cas particulier d'une technologie donnée les valeurs des paramètres nécessaires à l'utilisation du simulateur.

### V-1 Calibration des Oxydes Thermiques

La calibration des paramètres rhéologiques de l'oxyde thermique est nécessaire avant toute étude quantitative de l'oxydation du silicium. Les paramètres clés qu'il est nécessaire d'ajuster sont donnés dans le tableau V-1 :

Notation	Signification	Unité
$\eta_o$	Viscosité de la silice	Poises
$V_{po}$	Volume d'activation des contraintes sur la plasticité.	$A^3$

Table V-1: Paramètres rhéologiques de l'oxyde thermique

A ces paramètres mécaniques viennent s'ajouter des paramètres permettant de modéliser la réaction d'oxydation qui sont regroupés dans le tableau V-2 :

Notation	Signification	Unité
$V_d$	Volume d'activation des contraintes sur le coefficient de diffusion des agents oxydants à travers le verre.	$A^3$
$V_k$	Volume d'activation des contraintes sur le coefficient de réaction à l'interface Si/SiO <sub>2</sub>	$A^3$

Table V-2: Paramètres rhéologiques de l'oxyde thermique

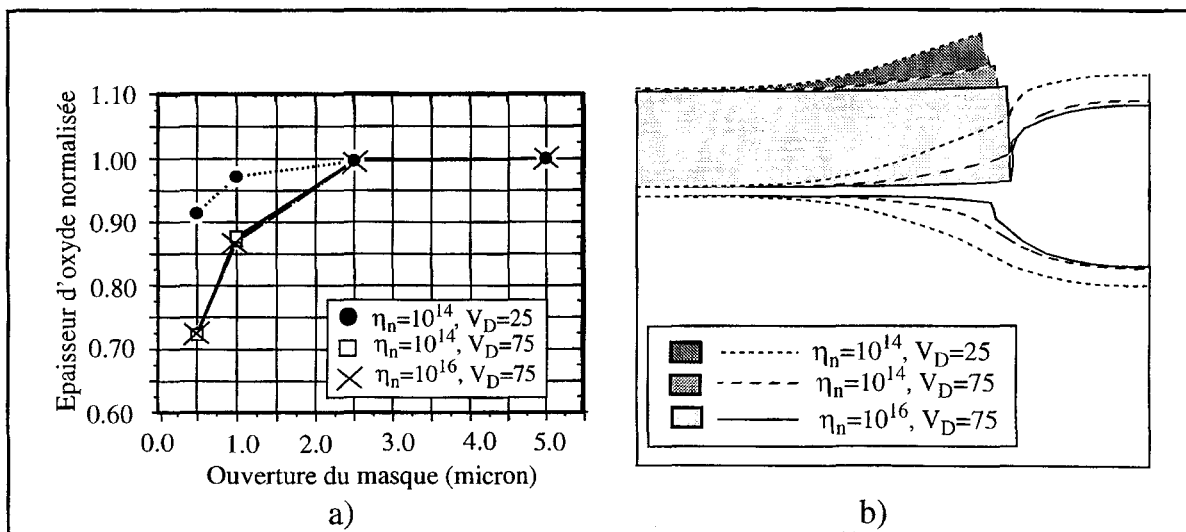
La calibration de ces paramètres a été effectuée dans le travail de thèse de Vincent Senez [6] pour la gamme de température de 800°C à 1100°C. Ces résultats sont nécessaires à une étude généralisée des contraintes mécaniques dans les structures silicium. C'est pourquoi nous reprendrons de manière très succincte la méthode utilisée pour obtenir cette calibration ainsi que les principaux résultats de ce travail.

Nous les compléterons par la calibration du comportement viscoélastique non linéaire pour des températures allant de la température ambiante à 800°C, afin de pouvoir tenir compte de l'influence des contraintes issues des autres étapes du procédé (dépôts, gravures). La prise en compte des contraintes thermiques et intrinsèques entraîne également l'ajustement du coefficient de dilatation thermique de la silice ainsi que du niveau de contraintes intrinsèques résiduel après oxydation.

La calibration directe des propriétés mécaniques de l'oxyde est basée sur les expériences de KAO [7], qui enregistrent la variation de l'épaisseur d'oxyde en fonction du rayon de courbure des motifs de silicium, pour des structures convexes et concaves. Cette variation d'épaisseur d'oxyde est directement reliée au niveau de contraintes présent dans le verre.

Etant donné l'importance de l'influence de la vitesse d'oxydation sur le développement des contraintes, le premier travail consiste à ajuster les coefficients linéaires et paraboliques du modèle de Deal et Grove, sur la cinétique 1D mesurée par KAO. Dans un second temps, ces mêmes structures concaves et convexes sont paramétrées et implantées analytiquement dans le simulateur.

Cependant, les expériences de KAO ne permettent pas à elles seules de déterminer de manière absolue les quatre coefficients (viscosité, coefficient d'activation de la plasticité, coefficient de réaction à l'interface et coefficients de diffusion à travers l'oxyde). Il est nécessaire de recourir à des expériences supplémentaires basées sur des structures d'oxyde épais de type LOCOS (Figure V-1).

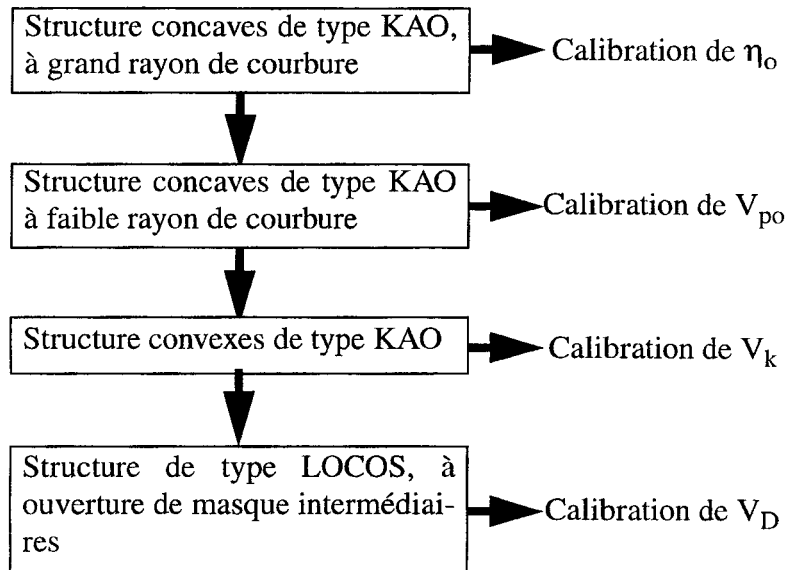


**Figure V-1:** Structures d'isolation par oxyde épais de type LOCOS. Des expériences sur ces géométries permettent de mettre en évidence l'influence des coefficients sur la cinétique d'oxydation.

L'analyse de la géométrie de ces structures permet de mettre en évidence que, une fois les valeurs de viscosité, plasticité et coefficient de réaction connues, pour des ouvertures du masque de nitrure de l'ordre du micron, l'épaisseur centrale de l'oxyde de champs n'est fonction que du paramètre  $V_D$ , volume d'activation de l'effet de la pression sur la diffusivité des agents oxydants. Il est donc alors possible de déterminer  $V_D$ .

Cette méthode peut être résumée par l'organigramme suivant, qui partant d'une

valeur arbitraire de  $V_D$ , permet de déterminer successivement  $\eta_o$ ,  $V_{po}$ ,  $V_k$  à partir de structure de type KAO concaves à grand rayon de courbure, concave à faible rayon de courbure et convexe. Finalement,  $V_D$  est réajusté à jeu de paramètre  $\eta_o$ ,  $V_{po}$  et  $V_k$  fixe, à partir de structures LOCOS afin d'obtenir la bonne épaisseur de l'oxyde de champ (Figure V-2).



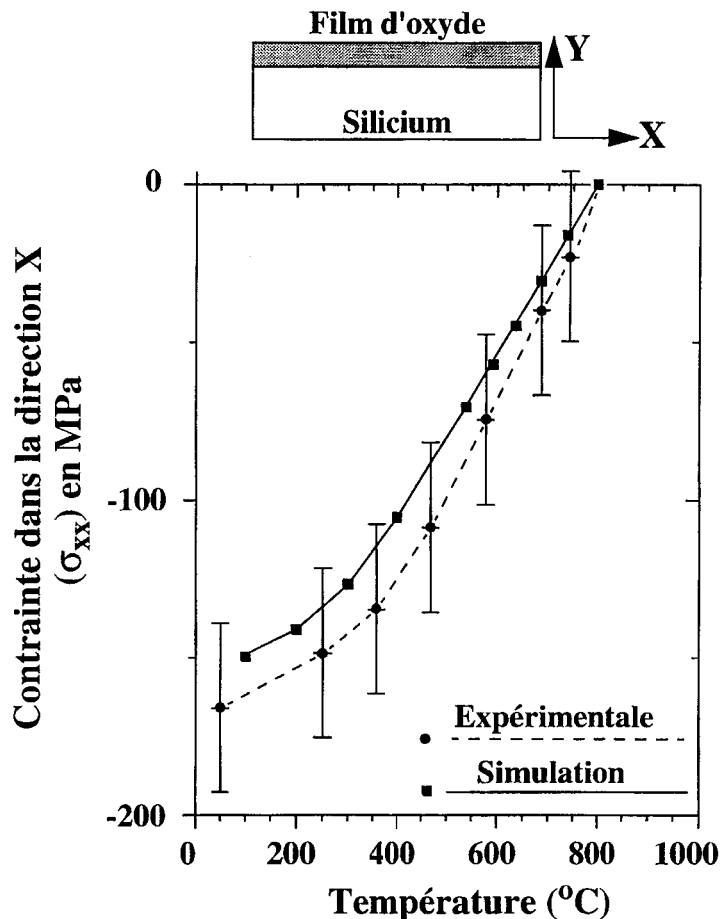
**Figure V-2:** Schéma de principe de la calibration des paramètres rhéologiques de l'oxyde thermique.

La calibration de la viscosité et du volume d'activation de la plasticité pour la gamme de températures allant de la température ambiante à  $800^{\circ}\text{C}$  est basée sur des expériences de recuit thermique de structures bicouches composées d'un oxyde thermique fin et d'un substrat de silicium. L'évolution de la contrainte dans le film d'oxyde est mesurée in situ pendant la descente de  $800^{\circ}\text{C}$  à la température ambiante. Ce même type de mesures expérimentales permet de déterminer la contrainte intrinsèque, à la température du procédé d'oxydation.

La contrainte dans le film est calculée in situ en mesurant par faisceau laser le rayon de courbure de la tranche de silicium au cours de la descente en température. Comme cela a été vu au chapitre 2, ce rayon de courbure est directement relié au niveau de contraintes dans le film.

Les données expérimentales sont proposées sur la figure V-3 (courbe en pointillés). Ces données sont tirées des travaux de Kobeda et Irene [8]. Les conditions expérimentales sont les suivantes: une oxydation humide est réalisée sur des tranches de silicium à  $800^{\circ}\text{C}$ , dans un four vertical, afin d'obtenir une couche d'oxyde de silicium de 0.2 micron d'épaisseur. Les tranches sont ensuite ramenées à la température ambiante à la vitesse de  $2^{\circ}\text{C}/\text{min}$ . Pendant ce refroidissement des tranches, la déformation de l'oxyde est enregistrée.





**Figure V-3:** Evolution de la contraintes thermiques dans l'oxyde lors du refroidissement de la structure expérimentale après oxydation. Le film d'oxyde de 0.2 micron d'épaisseur est obtenue par oxydation humide du silicium à 800°C. La précision de la mesure est de 60MPa. Les données expérimentales sont tirées des travaux de Kobeda et al [8].

La courbe en pointillés montre clairement deux régimes de comportement.

Un premier régime pendant lequel on observe une évolution linéaire de la contrainte en fonction de la température. L'accroissement de la contrainte est mesurée et égale à 0.28MPa/°C. Ce régime est de type élastique (évolution linéaire de la contrainte en fonction de la déformation).

Ensuite, on observe un second mode, dans lequel l'accroissement de la contrainte en fonction du gradient de température imposé est fortement ralenti et tend à saturer. Cette partie de la courbe correspond aux caractéristiques plastiques du film.

Le premier régime est observé dans la gamme de températures comprises entre 700°C et 300°C. Le second régime apparait lorsque la contrainte dans le film atteint 120MPa en compression c'est à dire aux environs de 300°C.

Au delà de 800°C, suivant les modèles classiques du comportement rhéologique de la silice, nous aurions pu observer le début d'un régime viscoélastique.

La structure simulée est une portion élémentaire du bicouche, située au centre de la tranche de silicium, pour laquelle l'épaisseur de l'oxyde est très petite devant celle du substrat. Ainsi les déformations thermiques subies par le film et le substrat sont uniformes.

Entre 700°C et 300°C, la modélisation élastique du comportement du film fait intervenir la différence des coefficients de dilatation thermique de l'oxyde et du silicium, ainsi que les modules d'Young ( $E_{ox}$ ) et coefficients de Poisson ( $\nu_{ox}$ ) de la silice. En prenant les valeurs communément admises pour  $E_{ox}$  et  $\nu_{ox}$ , respectivement  $E_{ox}=66\text{GPa}$  et  $\nu_{ox}=0.17$ , nous obtenons que  $\Delta\alpha = \alpha_{Si} - \alpha_{SiO_2}$  doit être de  $4 \cdot 10^{-6}/^\circ\text{C}$  pour que l'évolution de la contrainte en fonction de la température soit proche de la valeur observée. On constate dans la littérature un accord général sur la valeur du coefficient de dilatation thermique de l'oxyde ( $\alpha_{SiO_2}=0.5 \cdot 10^{-6}/^\circ\text{C}$ ) [9], [10]. Ceci nous permet de déduire la valeur du coefficient de dilatation du silicium ( $\alpha_{Si}=4.5 \cdot 10^{-6}/^\circ\text{C}$ ), valeur qui correspond bien aux différentes mesures rapportées dans la littérature [11], [12], même si la gamme des valeurs observées est relativement large [13] [14] [15].

L'évolution de la contrainte en fonction de la température ainsi modélisée est de  $0.23\text{MPa}/^\circ\text{C}$ , ce qui correspond parfaitement aux mesures expérimentales effectuées. La figure V-3 montre en traits pleins les résultats de simulation obtenus avec ces paramètres rhéologiques. On voit que la courbe simulée est très proche de la courbe expérimentale.

Pour les températures inférieures à 300°C, un phénomène de plasticité vient se rajouter au comportement de l'oxyde. La diminution de la pente dans la variation de la contrainte en fonction de la température indique le dépassement du régime élastique. La silice entre dans un régime plastique, pour lequel une augmentation de la sollicitation de déformation due à une variation de la température n'induit plus une augmentation de la contrainte dans le film. Au contraire, dans ce régime le niveau de contrainte résiduelle tend vers un niveau maximal.

Notre modèle permet de reproduire ce comportement, comme le montre la figure V-3, donnant l'évolution de la contrainte simulée en fonction de la température. Selon celui-ci, la contrainte de seuil à partir de laquelle le substrat entre en régime plastique est obtenue à l'incurvation de la courbe sur la figure V-3, au moment où la contrainte dans le film tend à saturer. La valeur numérique obtenue est  $125\text{MPa}$  ce qui correspond à un volume d'activation de la plasticité de  $125\text{A}^3$  ( $\sigma_c=2kT/V_c$ ).

A 700°C, l'oxyde thermique se comporte de manière élastique. Au delà de 700°C, intervient le régime viscoélastique jusqu'à 1100°C. Là, on entre dans le domaine de validité de la calibration précédente des paramètres de viscosité et de plasticité [16], [17].

Afin d'assurer une continuité de notre modèle rhéologique entre le comportement purement élastique en dessous de 700°C et le comportement viscoélastique pour des températures plus hautes, un niveau artificiel de viscosité est calculé pour la température de 700°C, qui de part sa valeur numérique très haute traduit bien à un comportement élastique à cette température.

En conclusion, le modèle développé s'appuie sur une calibration complète du comportement rhéologique de l'oxyde thermique depuis la température ambiante jusqu'à des hautes températures (1100°C), incluant à la fois les paramètres d'élasticité (Module d'Young et

de Poisson, coefficient de dilatation thermique) et de viscosité (coefficient de viscosité et d'activation de la plasticité), permettant une bonne prédiction des champs de contraintes générés dans les différents régimes mécaniques de l'oxyde.

Le tableau V-3 résume les différentes valeurs numériques ajustées.

Température	Module Young (dynes/cm <sup>2</sup> )	Coef. Poisson	Coef de dilatation therm. (°/C)	Viscosité (Poises)	Plasticité (A <sup>3</sup> )
<700°C	0.66 10 <sup>12</sup>	0.17	0.5 10 <sup>-6</sup>	1 10 <sup>17</sup>	125
700°C	0.66 10 <sup>12</sup>	0.17	0.5 10 <sup>-6</sup>	1 10 <sup>17</sup>	125
800°C	0.66 10 <sup>12</sup>	0.17	0.5 10 <sup>-6</sup>	9 10 <sup>15</sup>	300
900°C	0.66 10 <sup>12</sup>	0.17	0.5 10 <sup>-6</sup>	6 10 <sup>15</sup>	390
1000°C	0.66 10 <sup>12</sup>	0.17	0.5 10 <sup>-6</sup>	2 10 <sup>14</sup>	425
1100°C	0.66 10 <sup>12</sup>	0.17	0.5 10 <sup>-6</sup>	4 10 <sup>13</sup>	1000

Table V-3: Paramètres rhéologiques ajustés pour la silice.

### V-2 Calibration des Oxydes Dopés Déposés par APCVD (Atmospheric Pressure Chemical Vapor Deposition)

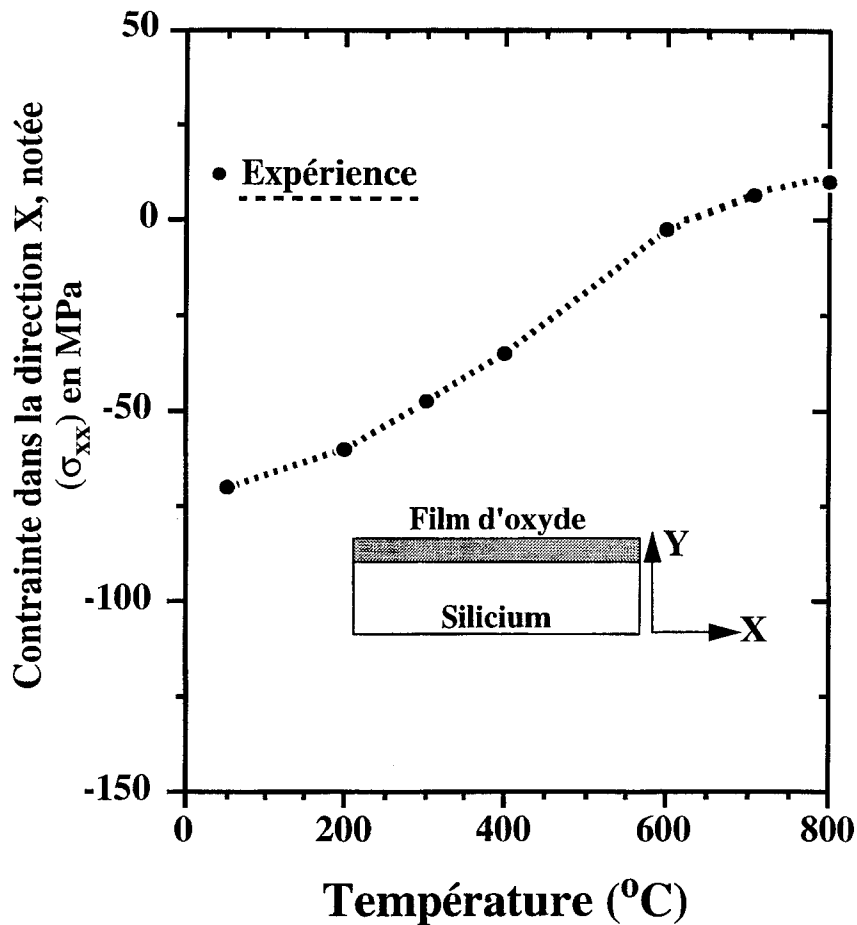
Les oxydes dopés fluent plus facilement et sur une gamme de température plus large que ceux qui ne le sont pas. On observe ce phénomène en étudiant l'évolution de la contrainte résiduelle dans un film d'oxyde dopé qui est ramené à la température ambiante après dépôt. Il est donc nécessaire de calibrer spécifiquement l'ensemble des paramètres rhéologiques (viscosité, plasticité, coefficients de dilatation thermique, contraintes intrinsèques) pour ce genre de matériau.

Afin d'observer ce phénomène, un dépôt d'oxyde de 0.2 micron d'épaisseur est réalisé sur des tranches de silicium dans un réacteur APCVD. La température de dépôt est de 800°C et l'oxyde est dopé in-situ au phosphore à raison de 10wt%, en ajoutant de la phosphine pendant la réaction de dépôt.

Le refroidissement des tranches de 800°C à la température ambiante se fait à raison de 5°C/min. Pendant cette descente en température, on mesure in situ l'évolution des contraintes mécaniques en fonction de la température. Cette mesure se fait par observation de la courbure des tranches. Les résultats expérimentaux sont issus des travaux de Bhushan [18].

Notre calibration s'appuie sur ces mesures. Le matériau est supposé densifié et stable, c'est à dire qu'il ne présente plus d'hystérésis lors des traitements thermiques.

La figure V-4 donne les résultats de la contrainte en  $x$ ,  $\sigma_{xx}$ , mesurée dans le plan du film en fonction de la température de la tranche.

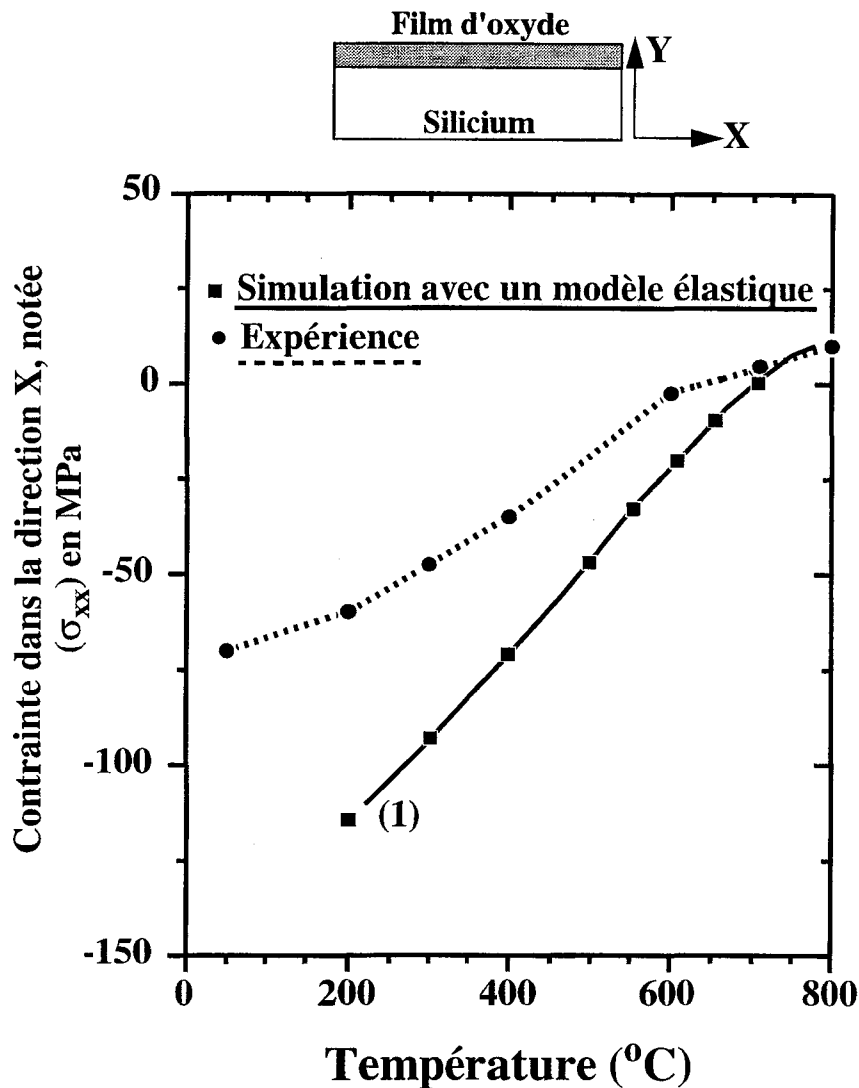


**Figure V-4:** Evolution de la contrainte en  $x$ ,  $\sigma_{xx}$ , mesurée dans le film d'oxyde en fonction de la température de la tranche [18].

Cette courbe fait apparaître un régime viscoélastique pour l'oxyde à des températures nettement plus basses que celles observables pour les oxydes thermiques. Ainsi vers 500°C, une incurvation de la courbe est déjà observée, correspondant au mécanisme de relaxation viscoélastique des contraintes.

D'autre part, à faible température (c'est à dire donc pour de fortes déformations) un régime «plastique» est observé comme pour les oxydes thermiques non dopés. Il se traduit par une saturation de la contrainte dans le film. Ce régime est atteint pour des valeurs proches de -60MPa.

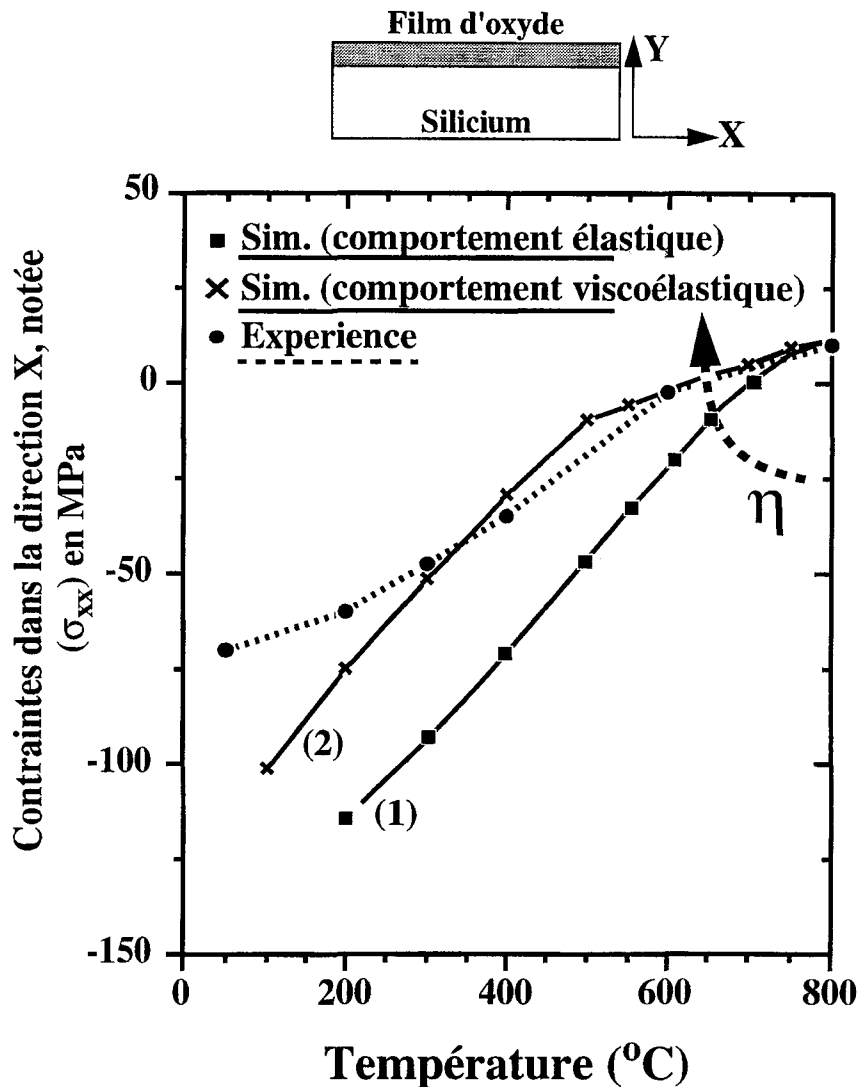
Considérons plus précisément le régime viscoélastique observé pour des températures comprises entre 500°C et 800°C. Si l'on considère que l'oxyde APCVD se comporte élastiquement dans cette gamme de températures alors l'évolution de la contrainte calculée est linéaire et les valeurs simulées sont en désaccord avec celles mesurées (Figure V-5).



**Figure V-5:** Evolution de la contrainte en x ( $\sigma_{xx}$ ) calculée en considérant un comportement élastique de l'oxyde dans la gamme de température (comportement de défaut de l'oxyde thermique). La courbe expérimentale est redonnée en pointillé pour comparaison [18].

Partant de ce résultat linéaire, si on introduit un comportement viscoélastique pour lequel on calibre la viscosité entre 500°C et 800°C, nous obtenons le résultat présenté à la figure V-6, en excellent accord avec l'expérience dans cette gamme de température.

Les valeurs de viscosité qui ont été calibrées pour cet oxyde APCVD dopé sont rapportées sur la figure V-7. On constate que les viscosités de l'oxyde APCVD dopé et de l'oxyde thermiques évoluent de manière similaire en fonction de la température. Cependant, l'oxyde dopé présente un régime viscoélastique à bien plus basse température.

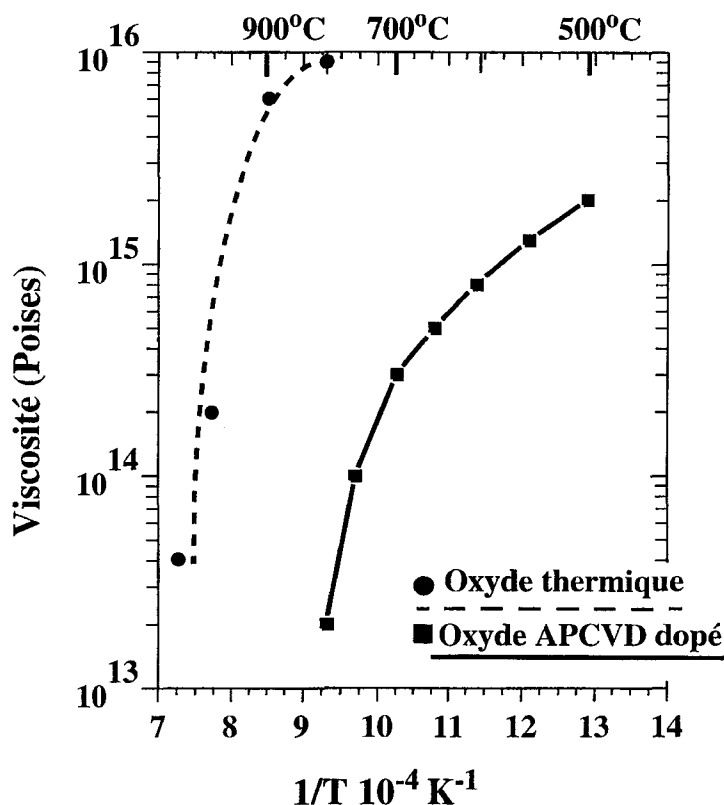


**Figure V-6:** Simulation des contraintes dans un oxyde dopé déposé par APCVD en fonction de la température : ajustement de la viscosité de l'oxyde en fonction de la température.

Entre 500°C et 300°C, l'oxyde dopé se comporte de manière élastique. Ce comportement est correctement pris en compte par le modèle avec les paramètres par défaut comme le montre la figure V-6.

Intéressons nous maintenant à la gamme de températures inférieure à 300°C. La courbe expérimentale s'incurve, montrant une saturation de la contrainte en dessous de 300°C. Ceci correspond au régime plastique de l'oxyde. La contrainte de seuil à partir de laquelle le régime plastique est déclenché est de l'ordre de -50MPa, ce qui correspond à une contrainte nettement plus faible que celle observée sur les oxydes thermiques. Les résultats de simulation obtenus avec notre modèle mécanique pour l'oxyde ne prennent pas en compte ce phénomène de saturation des contraintes, comme on peut l'observer sur la courbe V-8. Le modèle de

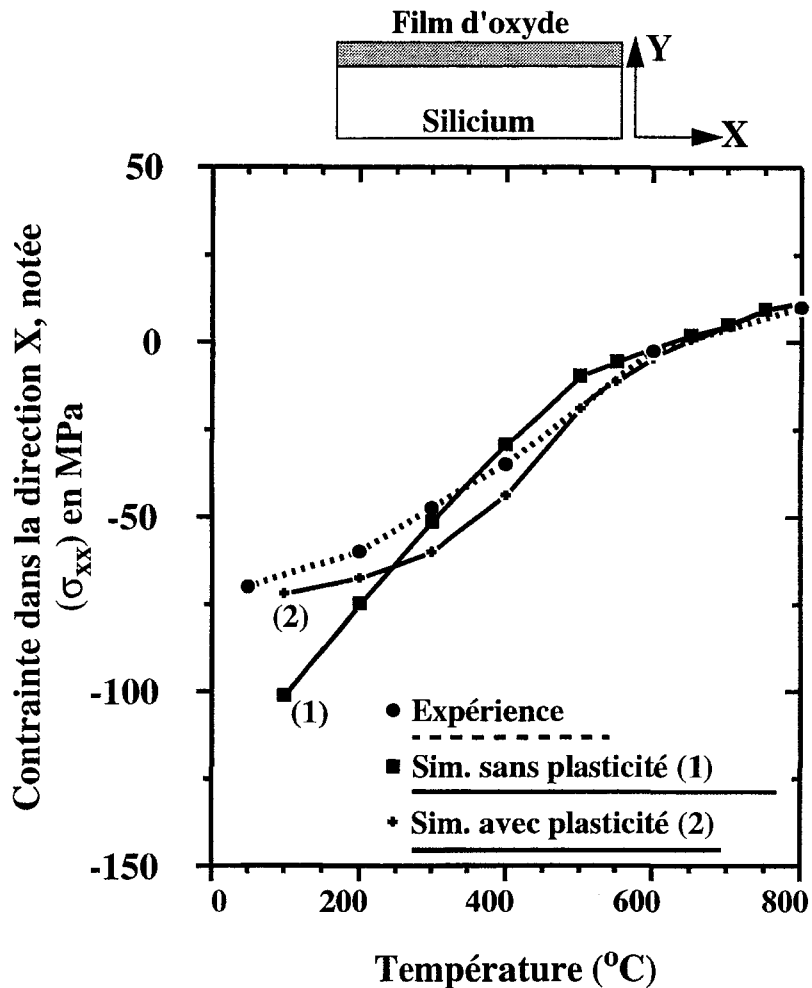
Eyring qui permet de rendre compte des comportements non linéaires de la viscosité est donc mal ajusté pour ce type d'oxyde. L'ajustement du paramètre  $V_{po}$  qui exprime le volume d'activation de l'effet des contraintes de cisaillement sur la viscosité dans le modèle de Eyring permet d'obtenir un bon accord entre l'évolution des contraintes prédites par la simulation et observées expérimentalement.



**Figure V-7:** Evolution de la viscosité en fonction de la température pour les oxydes APCVD dopé et thermique.

Sur la figure V-8, la courbe 2 est obtenue avec un volume d'activation de la plasticité égale à  $300A^3$  à  $300^\circ\text{C}$ . Ceci correspond à une contrainte de seuil de  $|\sigma_c| = 53\text{MPa}$ . On observe une réduction d'un facteur 2.5 de cette contrainte de seuil par rapport aux oxydes thermiques.

En conclusion, comme nous l'avons exposé dans le paragraphe V-1 pour l'oxyde thermique, nous avons rapporté ici la calibration que nous avons effectué des paramètres mécaniques des oxydes APCVD dopés dans le cadre d'une modélisation continue de leur comportement mécanique depuis la température ambiante jusqu'à  $800^\circ\text{C}$  [19].



**Figure V-8:** Evolution de la contrainte dans l'oxyde dopé en fonction de la température simulée avec un modèle complet incluant le niveau de viscosité obtenu précédemment et la plasticité. Le résultat expérimental [18] est comparé aux résultats des simulations incluant un comportement rhéologique (1) sans plasticité ou (2) avec plasticité.

### V-3 Calibration du Nitrure

La modélisation du comportement mécanique du nitrure est du même type que celle des oxydes; il est donc également nécessaire d'ajuster les paramètres rhéologiques tels que le coefficient de dilatation thermique, la viscosité, le coefficient d'activation de la plasticité et le niveau de contrainte résiduelle.

Comme cela a été fait pour les oxydes nous rappelons que le coefficient de dilatation thermique ainsi que la contrainte intrinsèque résiduelle seront pris indépendants des con-



ditions de fabrication du nitrure. La viscosité et la plasticité quant à eux seront traitées en fonction de la température.

Il n'existe pas dans la littérature d'équivalent pour le nitrure de la procédure expérimentale de KAO [7]. Cependant nous pourrions nous appuyer sur des simulations de structures de type LOCOS pour déterminer les paramètres rhéologiques du nitrure.

En effet, les résultats des études de simulations antérieures à ce travail indiquent clairement que le profil du 'bird's beak' (bec d'oiseau) dépend fortement des propriétés mécaniques du nitrure [6]. La longueur de transition (notée B2 sur la figure V-9) ainsi que la déflexion correspondante (notée H3) du nitrure peuvent être prises comme caractéristiques géométriques pour déterminer par ajustement les valeurs de la viscosité et de la plasticité du nitrure ( $\eta_n$ , et  $V_{PN}$ ).

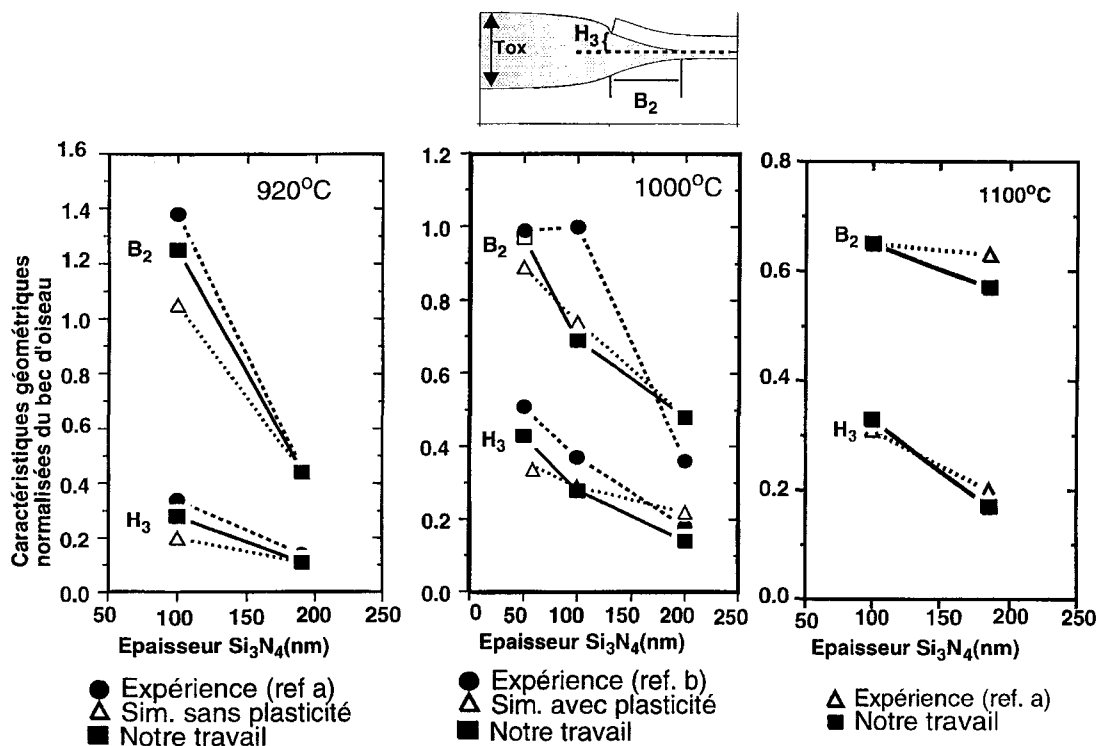
Les structures d'isolation LOCOS réalisées avec des couches de nitrure épaisses montrent une géométrie à faible déflexion. Le régime de plasticité n'est pas activé, seule donc la viscosité du nitrure régie la géométrie de la structure. De telles structures géométriques donnent accès à la viscosité. Il est donc possible d'ajuster la viscosité de la couche de nitrure en fonction des conditions de procédé par comparaisons successives entre la simulation et des mesures expérimentales.

Par contre, le volume d'activation de la plasticité se déduit de structures ayant des couches minces de nitrure, pour lesquelles on observe des déformations importantes du nitrure, et l'activation du régime de plasticité du nitrure.

Il est à noter que pour que ces extractions soient valables, il est nécessaire que le travail de calibration des propriétés mécaniques de l'oxyde ait été réalisé au préalable.

La figure V-9 compare les caractéristiques géométriques obtenues expérimentalement et par simulation sur des structures de type LOCOS, réalisées avec des procédés d'oxydation dans la gamme de température 900°C-1100°C. La déflexion du nitrure et la longueur de la zone de transition entre le piedestal et l'oxyde épais de champ sont reportées en fonction de l'épaisseur du nitrure. Cette figure inclut également des résultats numériques obtenus avec des modèles de nitrure purement viscoélastique à 920°C (pour lesquels  $V_{PN}$  est pris nul) et purement visqueux [20] à 1000°C. On remarque que l'introduction de la plasticité reproduit plus fidèlement la réalité expérimentale pour des couches de nitrure peu épaisses. Les longueurs importantes des transitions B2 et des déflexions H3, mesurées sur des structures avec des couches de nitrure inférieures à 100nm correspondent à une relaxation accélérée des contraintes dans le nitrure par diminution de la viscosité sous l'effet des contraintes.

Le jeu de paramètres final obtenu est donné dans le tableau V-4. En regard des valeurs obtenues pour le nitrure nous avons rappelé les valeurs calibrées pour l'oxyde thermique.



**Figure V-9:** Caractéristiques géométriques de structures LOCOS obtenues expérimentalement et par simulation. Le procédé correspond à une oxydation à des températures comprises entre 900°C et 1100°C. La déflexion du nitrure ( $H_3/Tox$ ) et la longueur du bec d'oiseau ( $B_2/Tox$ ) sont données pour différentes épaisseurs du nitrure. Les données expérimentales sont issues de [21] (ref. a), [22] (ref. b)

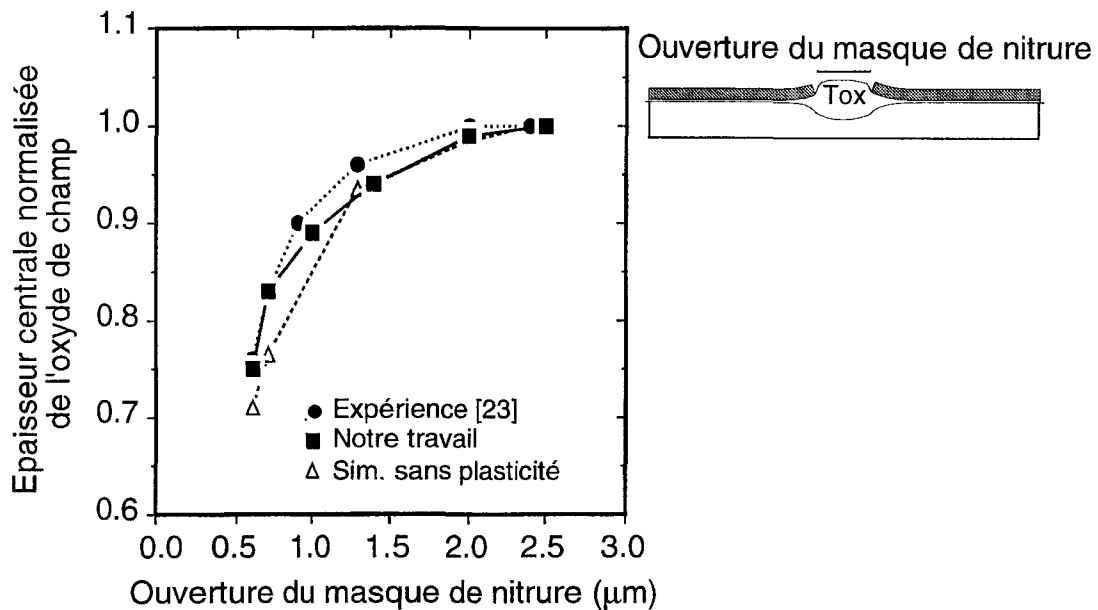
Températures (°C)	Viscosité du nitrure (Poises)	Plasticité du nitrure (Angs <sup>3</sup> )	Viscosité de l'oxyde (Poises)	Plasticité de l'oxyde (Angs. <sup>3</sup> )
800	$6.10^{16}$	120	$9.10^{15}$	300
900	$3.10^{16}$	130	$6.10^{15}$	390
1000	$5.10^{15}$	170	$2.10^{14}$	425
1100	$1.10^{15}$	350	$4.10^{13}$	1000

Table V-4: Ensemble des paramètres calibrés pour le modèle viscoélastique du nitrure et de l'oxyde thermique.

Pour valider le travail de calibration du nitrure, bien que ne pouvant pas nous appuyer sur des travaux expérimentaux de caractérisation du matériau tels que ceux effectués par KAO sur les oxydes thermiques, nous disposons de résultats sur des structures isolantes de

type LOCOS. Les structures présentent des effets des contraintes mécaniques sur la croissance de l'oxyde qui dépendent des caractéristiques géométriques du nitrure. La reproduction de ces effets par notre modèle viscoélastique calibré nous a permis de valider le travail d'ajustement des paramètres rhéologiques des matériaux utilisés.

Le premier exemple présente les variations de l'épaisseur centrale de l'oxyde de champ en fonction de l'ouverture du masque de nitrure (figure V-10).

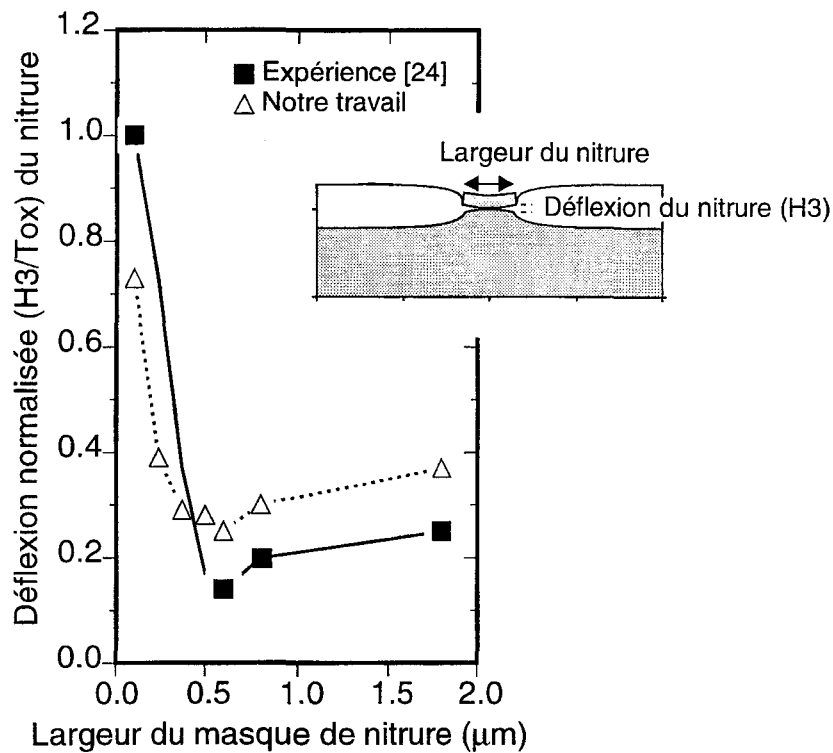


**Figure V-10:** Phénomène de réduction de l'épaisseur centrale de l'oxyde de champ pour des ouvertures du masque de nitrure submicroniques. Les conditions du procédé sont : Temp= 1000°C, Tpad=20nm, Tsin=100nm.

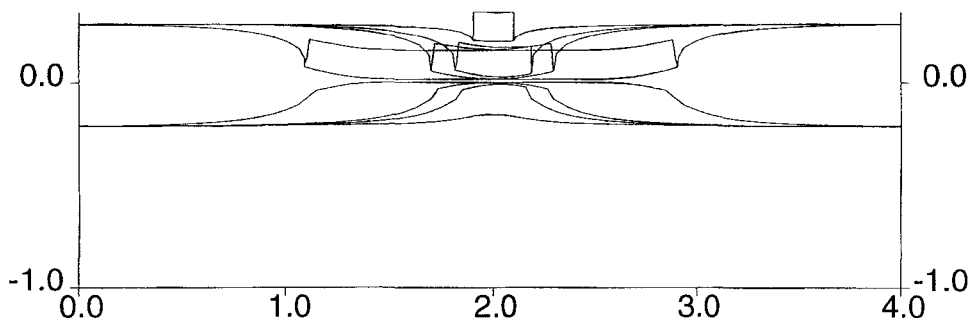
Les résultats expérimentaux ont été obtenus par Coulman [23]. On s'aperçoit que si le nitrure de silicium est modélisé comme un matériau viscoélastique linéaire, alors les contraintes mécaniques qu'il engendre dans l'oxyde, pour des ouvertures du masque les plus petites, sont trop importantes. En effet on observe un amincissement de l'oxyde plus important que la réalité correspondant à un ralentissement exagéré de la cinétique d'oxydation dû à la trop forte pression hydrostatique dans l'oxyde. Par contre, lorsque l'on inclut le modèle autorisant un écoulement plastique, les niveaux de contraintes atteints dans l'oxyde sont nettement plus faibles et les épaisseurs d'oxydes obtenues sont plus proches de la réalité. L'accord avec l'expérience devient alors tout à fait correct.

L'exemple suivant correspond au phénomène de perçage de l'oxyde observé pour des masques de nitrure très étroits. Aux vues des résultats expérimentaux de la figure V-11, on observe que la déflexion du nitrure atteint un minimum pour des longueurs intermédiaires du masque. Une analyse des contraintes [24] indique qu'un effet de levier apparaît pour des longueurs submicroniques. Ceci se traduit par un accroissement de la force qu'exerce le nitrure sur l'oxyde qui ralentit la vitesse de croissance de cet oxyde, à chaque bord du masque. Ainsi

le bec d'oiseau se trouve réduit. Cependant en dessous de 0.6 micron, les profils des concentrations en agents oxydants se rejoignent sous le masque qui perd alors son efficacité de barrière à l'oxydation (figures V-11 et V-12).



**Figure V-11:** Evolution de la déflexion normalisée (H3/Tox) du nitrure en fonction de la largeur du masque de nitrure. La structure LOCOS est réalisée dans les conditions suivantes: Température: 1000°C, piedestal SiO<sub>2</sub> (15nm) / épaisseur de nitrure (140nm).



**Figure V-12:** Vue bidimensionnelle des simulations de la structure LOCOS avec les différentes ouvertures du masque de nitrure (1.8 $\mu\text{m}$ , 0.6 $\mu\text{m}$ , 0.37 $\mu\text{m}$  et 0.1 $\mu\text{m}$ ).

Les prise en compte par la simulation de ces effets des contraintes mécaniques et le bon accord qualitatif et quantitatif obtenu avec les observations expérimentales constitue une validation globale de la calibration des propriétés mécaniques du nitrure mais aussi de celles de l'oxyde thermique.

## V-4 *Contraintes Intrinsèques*

Pour chaque matériau, le niveau des contraintes résiduelles après l'étape de formation du film, soit par dépôt ou soit par oxydation thermique, doit tenir compte des contraintes liées aux phénomènes physiques mis en jeu lors de la croissance, c'est à dire les contraintes intrinsèques.

Le travail de calibration de ces contraintes intrinsèques s'appuie sur des observations réalisées sur des films d'oxyde thermiques ou déposés par APCVD (dopés et non dopés), ou encore sur des films de polysilicium ou de nitrure. La méthode expérimentale consiste à déterminer la contrainte résiduelle, juste après la formation du film, à la température du procédé, en mesurant optiquement la courbure des tranches échantillons.

Différents cas de mesures expérimentales peuvent se présenter.

La mesure de la courbure est réalisée directement dans le réacteur lors de la croissance de la couche. Il s'agit d'une mesure in situ nécessitant un appareillage spécifique permettant d'accéder optiquement aux tranches pendant le procédé. Dans ce cas la contrainte mesurée correspond directement à la contrainte intrinsèque due au dépôt, en prenant l'hypothèse que la tranche témoin était sans contrainte avant le dépôt.

La mesure de la courbure de la tranche est réalisée à température ambiante après le dépôt. Ce type de mesure est plus courant car plus facile à réaliser. Dans ce cas, à cette contrainte intrinsèque du dépôt vient s'ajouter la contrainte thermique créée par le refroidissement de la tranche de la température de procédé à l'ambiante. Cette composante thermique sera facilement calculée à l'aide du simulateur. Avec l'hypothèse élastique, les deux composantes s'ajouteront directement.

Pour les oxydes déposés, il existe de nombreuses publications rapportant ce type d'expériences, par exemple par Bhushan [18]. Dans cet article, les oxydes non dopés et dopés au phosphore à 10 wt%, densifiés sont étudiés. Ces résultats correspondent à des mesures in situ. Nous en avons extrait deux valeurs, 77MPa pour les oxydes non dopés et 12MPa pour les oxydes dopés au phosphore. Rappelons que ces valeurs ne sont pas absolues: elles dépendent de nombreux paramètres [25].

La contrainte intrinsèque d'un oxyde thermique est le sujet de controverse [26]. Nous avons décidé de la supposer nulle.

La contrainte intrinsèque du polysilicium est obtenue à partir de mesures ex situ, à température ambiante. Il s'agit de mesures de courbures de tranches effectuées sur des échantillons présentant un film de polysilicium de 0.3 micron d'épaisseur, déposé par LPCVD à 625°C [9] [27]. La valeur donnée dans le tableau V-5 de synthèse (-500MPa). Elle ne tient pas compte bien entendu de la composante thermique. Celle-ci est obtenue par simulation en considérant un comportement élastique du polysilicium entre 625°C et 25°C, et en prenant pour le coefficient de dilatation thermique et la rigidité élastique les valeurs de  $3.8 \cdot 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$  [12] et 259 GPa, respectivement. Ces coefficients sont pris par défaut dans le simulateur IMPACT-4 et correspondent aux valeurs du silicium monocristallin.

En ce qui concerne le nitrure, on trouve dans la littérature, comme pour les oxydes différentes valeurs de contraintes résiduelles après le dépôt. Les différences notées sont relatives aux conditions expérimentales du procédé de dépôt. Les films nitrures formés par LPCVD et CVD sont généralement tensiles et exhibent de fortes contraintes résiduelles, de l'ordre du Giga-Pascal à température ambiante. Ainsi Tamura mentionne qu'une couche de nitrure CVD épaisse de plus de 300 nm peut se craquer par elle même [28]. Il faut noter de plus que certaines conditions de fabrication, comme un implant juste après le dépôt, peuvent modifier, voire compenser ces contraintes résiduelles dans le nitrure [29] [30] [31]. Par contre les films de nitrure déposés par plasma présentent des contraintes allant du tensile au compressif, suivant la température du procédé [32]. Enfin les nitrures obtenus par sputtering sont eux généralement compressifs (de l'ordre de -0.1GPa à -0.5GPa) [33].

Cependant, il faut noter que dans le cadre de l'industrie des semi-conducteurs (technologies modernes DRAM ou logiques), le nitrure est essentiellement déposé dans des fours verticaux par LPCVD, créant des contraintes de l'ordre du Giga-Pascal. En considérant un niveau résiduel de 1GPa à température ambiante et compte tenu de la composante thermique induite par le refroidissement de la tranche depuis la température de croissance (généralement de l'ordre de 800°C) à 25°C, nous déduisons une contrainte intrinsèque de 500MPa [29] [31].

La table V-5 récapitule les valeurs des contraintes intrinsèques, à température de procédé déterminé, suivant les résultats expérimentaux mentionnés dans les paragraphes ci-dessus, et prises comme valeurs par défaut dans IMPACT-4

Matériau	Oxyde thermique [8]	Oxyde APCVD non dopé [18]	Oxyde APCVD dopé [18]	Polysilicium LPCVD [9] [27]	Nitrure LPCVD [29] [31]
Contrainte intrinsèque résiduelle (MPa)	0 tensile	77 Tensile	12 Tensile	-500 Compressive	500 Tensile

Table V-5: Valeurs des contraintes résiduelles intrinsèques pour des matériaux stabilisés.

## Références Bibliographiques du Chapitre 5

- [1] H Miura, N Saito, N Okamoto, "Mechanical Stress Simulation During Gate Formation of MOS Devices Concerning Crystallization Induced Stress of P-doped Silicon Thin Films", Proceedings of SISDEP 1993, pp. 177-180, 1993.
- [2] N. Nassua, R. A. Levy and D.C. Chadwick, J. Electrochem. Soc., vol. 132, p. 409, 1985.
- [3] E.P. Eernisse, "Viscous Flow of Thermal SiO<sub>2</sub>", Applied Physics Letters, vol. 30, p. 290, 1977.
- [4] S.M. Sze, "VLSI Technology", 2ème Ed., NY, Mc Graw Hill, 1988.
- [5] M. Stadmüller, "Mechanical Stress of CVD Dielectrics", Journ. of Electrochem. Soc. , vol. 12, DECEMBER 1992.
- [6] V. Senez, "Modélisation Bidimensionnelle de l'Oxydation du Silicium: Analyse Viscoélastique des Contraintes", Thèse de doctorat de l'Université des Sciences et Technologies de Lille, 10 Janvier 1995.
- [7] D.B. Kao, J.P. Mac Vittie, W.D. Nix and K.C. Saraswat, "Two-Dimensional Thermal Oxidation of Silicon : 1- Experiments", IEEE Trans. on Electr. Devices, vol. 34, n. 5, p.1008, 1987.
- [8] E Kobeda et E.A. Irene, "In Situ Stress Measurements during Thermal Oxidation of Silicon", J. Vac. Science and Technology, vol. B7, p.163, 1989.
- [9] D. Chidambarao, J.P. Peng and G.R. Srinivasan, "Stresses in Silicon Substrates near Isolation Trenches", Journ. Applied Physics, vol. 70, p. 4816, 1991.
- [10] O. V. Mazurin, M.J. Streltsina and T.P. Shvaiko-Shaikovskaya, Hand Book of Glass Data, Amsterdam, Elsevier, pp. 31-44, 1983.
- [11] L. Maissel, "Thermal Expansion of Silicon", Journ. of Applied Physics, p. 211, 1960.
- [12] T. Suzuki, A. Mimura and T Ogawa, "The Deformation of Polycrystalline Silicon Deposited on Oxide-Covered Single Crystal Silicon Substrates", J. Electrochem. Soc., vol. 124, n. 11, pp. 1776-1780, 1977.
- [13] M. Ambrée, "Détermination of the Mechanical Stress in Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposited SiO<sub>2</sub> and SiN Layers", J. Applied Phys., vol. 70, n. 6, September 1991.
- [14] Suhir, "Stresses in Multilayered Thin Films on a Thick Substrate", MRS Proceeding, vol. 91, 1987.
- [15] M. Guyot, "Micro-Raman Study of Thermoelastic Stress Distribution in Oxidized Silicon Membranes and Correlation with Finite Element Modeling", Materials Science and Engineering vol. B 46, p. 24, 1997.
- [16] P. Ferreira, V. Senez, D. Collard and B. Baccus, "Study of Local Oxidation of Silicon with Calibrated Nitride Model", Proc of ESSDERC 94, Edinburg, Scotland, pp. 259-262, September 1994.

- [17] V. Senez, D. Collard, P Ferreira and B Baccus, "Two Dimensional Simulation of Local Oxidation of Silicon: Calibrated Viscoelastic Flow Analysis", IEEE Trans. on Electron Devices, vol. 43, n. 5, pp. 720-731, May 1996.
- [18] B. Bhushan and S.P. Murarka "Stress in Silicon Dioxide Films Deposited using Chemical Vapor Deposition Techniques and Effects of Annealings on these Stresses", Journ. of Vacuum Science and Techn., vol. B, n. 8, p. 1068, 1990.
- [19] P. Ferreira, V. Senez and B. Baccus, "Mechanical Stress Analysis of an LDD MOSFET Structure", IEEE-TED, vol. 43, n. 9, September 1996.
- [20] P.B. Griffin and C.S Rafferty "A Viscous Nitride Model for Nitride / Oxide Isolation Structures", Proceedings of IEDM 1990, p. 741, 1990.
- [21] N. Guillemot, "A New Analytical Model of Bird's Beak", IEEE, Trans. on Electron Devices, vol. ED-34, p. 1033, 1987.
- [22] E. Bassous, H.N. Yu and W. Maniscalco, "Topology of Silicon Structures with Recessed SiO<sub>2</sub>", J. Electrochem. Soc., vol. 123, p. 1929, 1976.
- [23] B Coulman, C Aussens, P.A. Van Den Plas and N. Wils, "LOCOS Isolation for VLSI", Proceedings of 2nd Intern. Symposium on VLSI Sc. and Techn., p. 759, 1989.
- [24] P.U. Kenkare, J.R. Pfister, J.D. Hayden, R. Subrahmanyam, R.I. Hedge, and V Kanshik, "Sensitivity of Field Isolation Profiles to Activate Pattern", Proceedings of the IEDM 93, p.479, 1993.
- [25] P. Le Duc, "Etudes des Contraintes Mécaniques dans les Edifices d'Interconnexions d'un Procédé Submicronique", thèse de doctorat de l'Université des Sciences et Technologies de Lille, Février 1999.
- [26] T.J. Delph, "Intrinsic Strain in Si/SiO<sub>2</sub> thin films", J. Appl. Phys. vol. 83, n. 2, January 1998.
- [27] M.S. Choi and E.W. Hearn, "Stress Effects in Boron-Implanted Polysilicon Films", J. of Electrochem. Soc., vol. 131, n. 10, p. 2443, 1984.
- [28] M. Tamura and H. Sunami, Jpn J. Applied Physics, n. 8, p. 1097, 1972.
- [29] S.M. R.O. Schwenker, J. of Applied Physics, n. 49, p. 3259, 1978.
- [30] D Qingyun, Z. Liankui, C. Mengzhen and M. Junru, J. of Vacuum Science and Technology, vol. B, n. 7, p. 1591, 1989.
- [31] O. Tabata, S. Sugiyama, and M. Takigawa, Applied Physics Letters, n. 56, p. 1314, 1990.
- [32] W.A. Classens, W.G. J. N. Valkenburg, M.F.C. Willemsen and W.M.v.d. Wijgert, J. of Electrochemical Soc., vol. 132, p. 893, 1978.
- [33] T. Serikawa and A. Okamoto, J of Electrochemical Soc., vol. 131, p. 292, 1977.



# Chapitre 6

---

## *VI- Applications*

*Ce chapitre traite de deux études d'analyse et d'optimisation des contraintes mécaniques, menées sur des procédés industriels, appliquant les modèles de calcul généralisé des contraintes dans les structures micro-électronique silicium, développés au cours de ce travail de thèse. Nous étudierons successivement le procédé submicronique BiCMOS mis en production par Philips Composants sur son site industriel de Caen, et un procédé CMOS mis au point par ST Microelectronics à Crolles.*

*Pour chaque étude, nous analyserons l'évolution des contraintes mécaniques au cours du procédé, mettant en évidence les étapes les plus critiques et cherchant à proposer des modifications de procédé, dans le but de diminuer les niveaux de contraintes résiduelles dans les structures.*

*Ces études se basent sur la calibration des modèles numériques exposée précédemment.*

*Les résultats obtenus pour chacune de ces applications et leur bon accord avec les observations faites par nos partenaires industriels sur leurs procédés permettent de valider la modélisation et la calibration rapportées dans ce manuscrit.*

## **VI-1 Analyse des Contraintes dans un Procédé BICMOS à Isolation LOCOS**

La première application étudiée de façon qualitative les contraintes générées lors de la fabrication de structures transistor de type MOS, isolées par des structures LOCOS. Le procédé simulé correspond à une technologie BICMOS 0.8 micron utilisée sur le site de Philips à Caen. La seconde partie de cette analyse se concentre sur un procédé DMOS de semi puissance, développé également par Philips.

L'objectif de cette analyse est double: d'une part, illustrer sur un exemple industriel les capacités du simulateur à calculer les contraintes mécaniques induites par le procédé complet et, d'autre part, mettre en évidence les étapes critiques en termes de génération de contraintes et apporter des variations de procédé susceptibles de diminuer les niveaux de contraintes résiduelles. Ainsi, nous analyserons l'évolution du champs de contraintes au cours du procédé et investiguerons plus précisément l'influence des films déposés (films de polysilicium ou d'oxyde TEOS) ainsi que la forme des espaceurs dans la génération des contraintes mécaniques.

Nous analyserons également dans la dernière partie de cette application l'étape qui permet d'isoler la partie active du transistor (FRONT-END) de la première couche de métallisation (BACK-END). Cette isolation se fait par un diélectrique TEOS que l'on grave pour positionner les contacts de grille, de source et de drain. Nous montrerons que, en termes de contraintes, il est très avantageux à ce niveau d'utiliser un bicouche constitué de BPSG et de TEOS au lieu d'un seul film de TEOS. Cette modification du procédé a été introduite sur la technologie servant à fabriquer les DMOS de puissance chez Philips à Caen. Ce procédé est très proche du procédé BICMOS sur lequel nous avons analysé l'influence de la couche tampon de BPSG. Nous montrerons que cette modification permet d'améliorer significativement le rendement de cette technologie.

### **VI.1.1-Descriptif du Procédé Simulé**

Le procédé technologique à simuler comprend les étapes de pré-processing (formation du piedestal d'oxyde et du piedestal de nitrure), l'oxydation de champ et la formation du transistor MOS (Figure VI-1).

Les tranches sont épitaxiées  $10\Omega/\text{cm}$  de type P-, orientée  $\langle 100 \rangle$ .

La première étape consiste en une oxydation humide des tranches à  $950^\circ\text{C}$  sur four vertical, pour former une couche d'oxyde thermique de 40nm (le piedestal d'oxyde). Cette couche sert de tampon au film de nitrure de  $0.1\mu\text{m}$  déposé ensuite à  $800^\circ\text{C}$ . La formation de ces deux couches est appelé pré-processing. Celles-ci servent à créer le masque pour l'oxydation de champ qui suit et qui va isoler les structures actives entre elles. Le masque définissant ces zones actives est noté OD.

La formation des zones isolantes qui suit est réalisée par une oxydation humide à  $1000^\circ\text{C}$  pendant 165 minutes. On forme ainsi un oxyde de 0.7 micron d'épaisseur.

Viennent ensuite les étapes permettant la formation du transistor MOS. La pre-

mière consiste à former l'oxyde de grille par une oxydation sèche à 950°C pour former 40nm d'oxyde. On dépose ensuite par LPCVD une couche de polysilicium de 300nm à 650°C, que l'on grave à travers un masque afin de définir les lignes des grilles.

Après la formation des lignes de grille, il est nécessaire de créer les espaceurs qui serviront à éloigner les implants de source et drain du canal et déterminer la longueur effective du transistor. Pour cela, un dépôt oxyde APCVD est effectué à 900°C, pour former un film de 260nm d'épaisseur. Cette couche est ensuite gravée de manière isotrope pour former la structure LDD.

L'étape suivante consiste à implanter les structures pour former les zones de source et de drain. Les implants sont suivis des recuits nécessaires à la diffusion et activation des dopants. Ces recuits entrent également dans le budget thermique des implants formant les caissons N et P et des implants d'ajustement des  $V_t$ .

Ces étapes d'implantation sont prises en compte dans notre étude à travers leurs traitements thermiques. Les traitements thermiques nécessaires aux implants de source et drain que nous simulerons ici correspondent à des recuits sur fours verticaux, bien que de plus en plus ces étapes se fassent sur RTP (Recuits Thermiques Rapides) pour former des jonctions peu profondes. Ils se décomposent en une:

Montée à 900°C en 10 minutes,

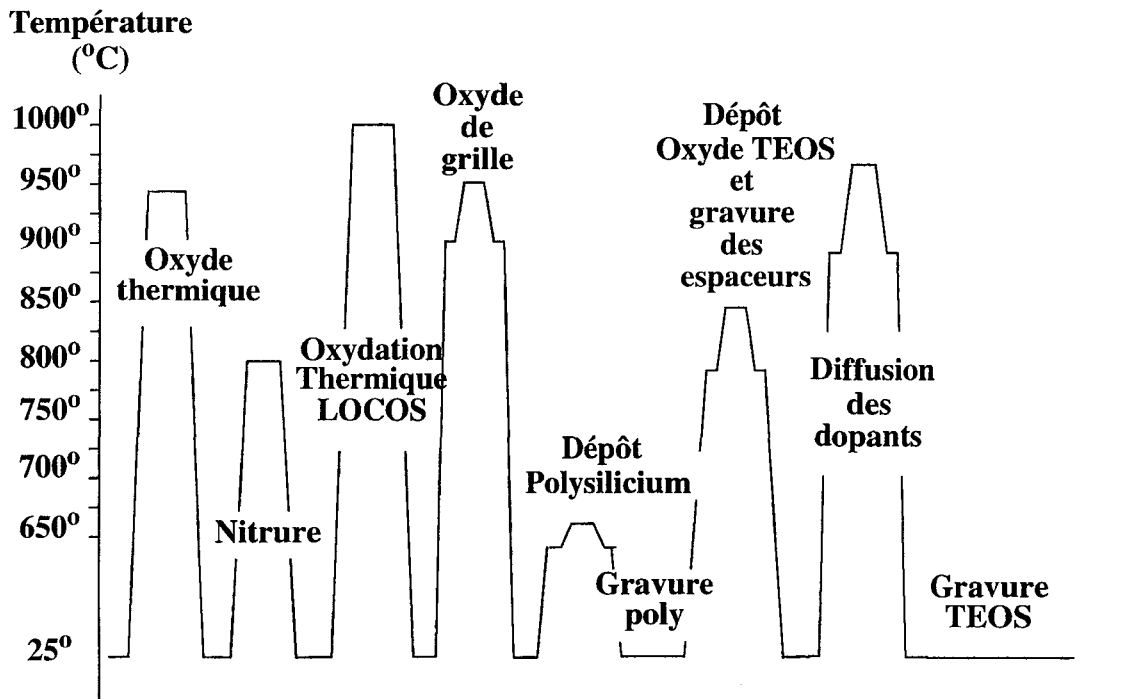
Stabilisation à 900°C pendant 22 minutes puis,

Montée à 975°C à 3.5°C/min et recuit à 975°C pendant 65 minutes,

Descente en température d'abord à 900°C à 3.5°C/min suivie d'une stabilisation pendant 20 minutes et ensuite de la descente de la nacelle à température ambiante en 10 minutes.

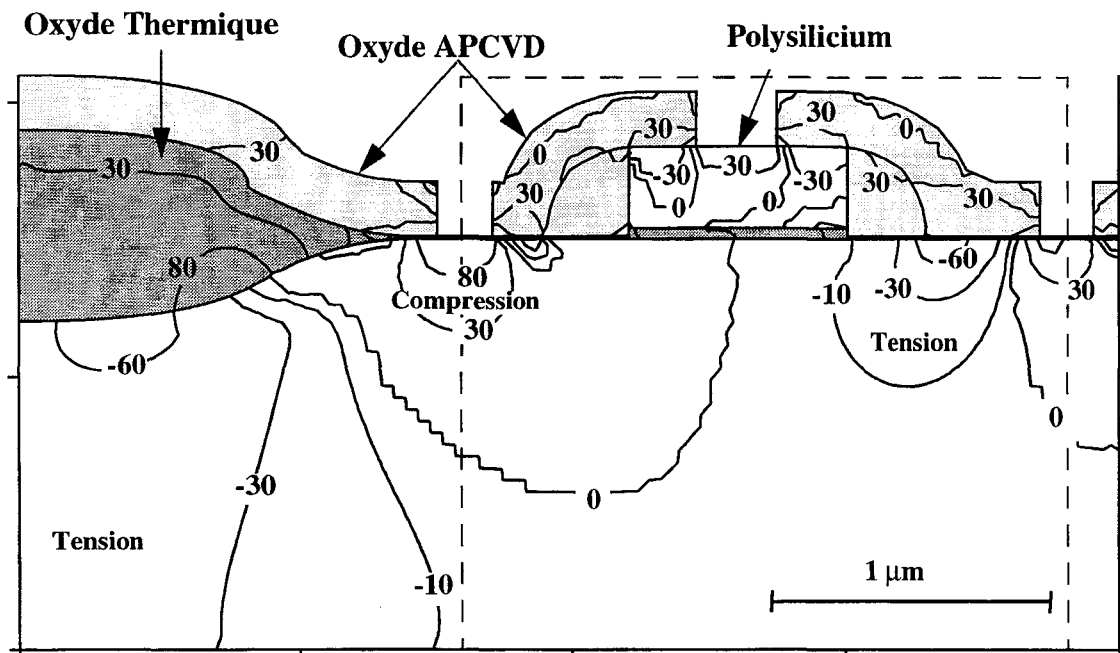
Finalement une couche d'oxyde TEOS est déposée. L'épaisseur de cette couche est de 0.2 micron. Elle est déterminée pour permettre une isolation optimale entre les transistors et les lignes métalliques qui seront réalisées dans la suite du procédé. Les températures élevées mises en jeu lors de cette étape tiennent compte des recuits nécessaires à la densification du TEOS. Cette couche est ensuite gravée par un procédé de gravure sèche pour former les zones de contact de grille, de source et de drain.

Lors de chaque étape, la simulation prend en compte les variations thermiques de la température ambiante jusqu'à la température de travail et puis le retour à la température ambiante. De plus, les contraintes intrinsèques des matériaux sont ajoutées au moment des dépôts, suivant les modèles explicités précédemment. La calibration de ces modèles permet de tenir compte des niveaux de contrainte observés sur cette technologie par Philips.



**Figure VI-1:** Description des étapes du procédé induisant des variations thermiques importantes.

La figure VI-2 donne la distribution du champs de contrainte à la fin du procédé. Les isovaleurs correspondent à la pression hydrostatique. Elles sont exprimées en MPa. On constate que le substrat est majoritairement en tension. Des niveaux élevés sont atteints sous l'oxyde de champs et sous le diélectrique TEOS. Dans les zones de contact, le silicium est en compression [1].

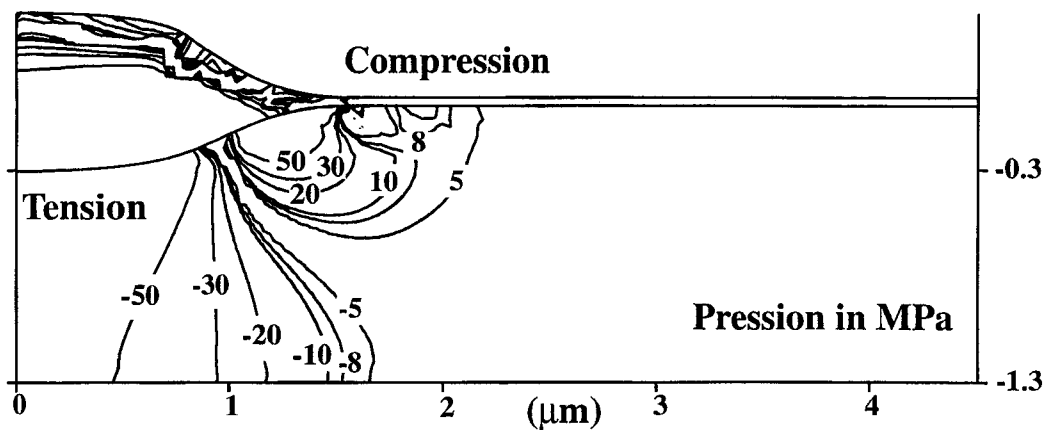


**Figure VI-2:** Champs des pressions hydrostatiques dans la structure simulée à la fin du procédé. Les isovaleurs sont données en MPa.

Nous allons analyser maintenant pour chaque étape clé l'évolution du niveau des contraintes générées par ce procédé.

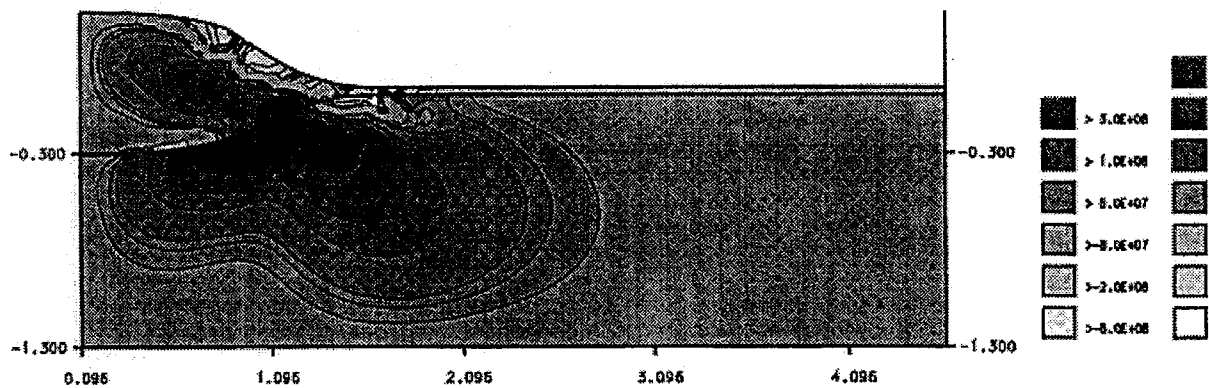
### VI.1.2-Evolution des Contraintes au cours du Procédé

La figure VI-3 présente la distribution 2D de la pression hydrostatique après la formation du LOCOS. On constate que le silicium est fortement en tension avec des maxima atteignant 50 MPa sous l'oxyde de champ alors que des zones compressives également d'amplitude élevées apparaissent près des zones de becs d'oiseaux.



**Figure VI-3:** Distribution 2D de la pression hydrostatique (en MPa) après la formation du LOCOS.

La figure VI-4 présente la distribution des contraintes de cisaillement  $\sigma_{xy}$ , qui atteignent leur maximum ( $>50\text{MPa}$ ) dans les zones de décrochement (becs d'oiseaux). Ce sont dans ces zones que les risques d'apparition de défauts sont les plus importants.



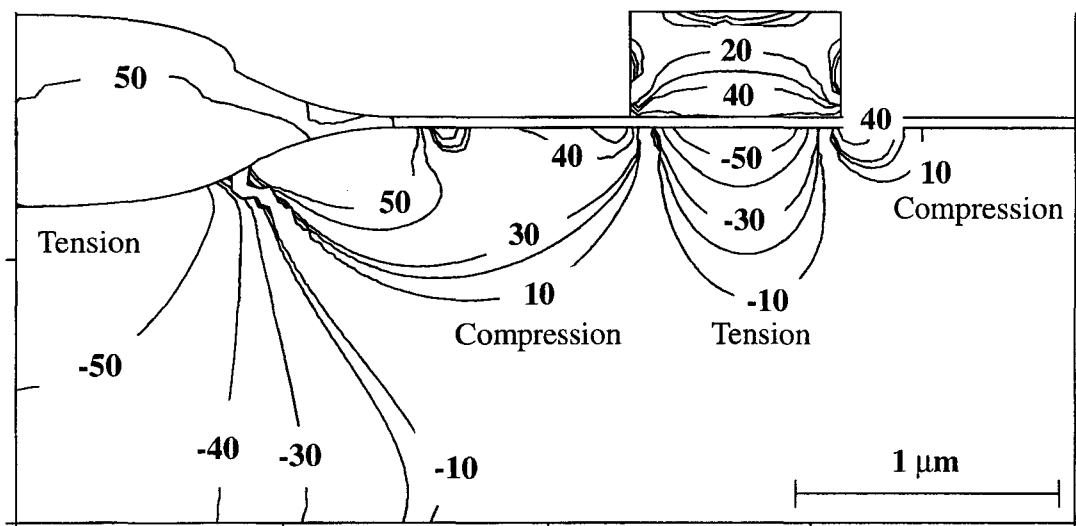
**Figure VI-4:** Distribution 2D de la contrainte de cisaillement (en dynes/cm<sup>2</sup>) après la formation du LOCOS.

A ce stade du procédé, on peut conclure que l'étape de formation du LOCOS génère de hauts niveaux de contraintes mécaniques dans le substrat de silicium, mais que ces

pics de contraintes ne s'étendent pas dans la zone où doit être fabriquée la partie active du transistor. Par conséquent, notre optimisation pourra se concentrer sur cette zone active et ignorer dans un premier temps l'optimisation du LOCOS, étude qui a déjà été rapportée par ailleurs [2].

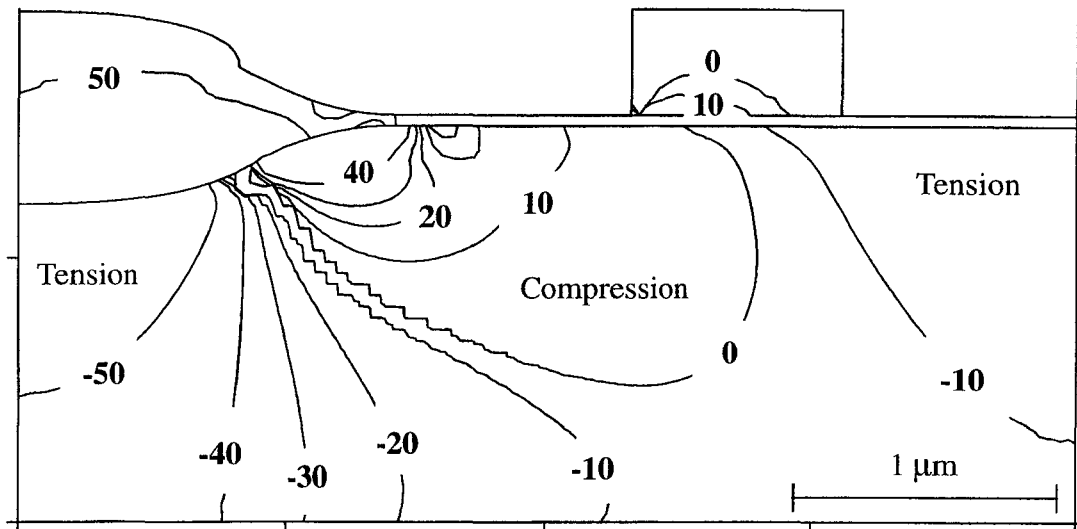
Les résultats de la simulation de l'étape suivante du procédé sont présentés sur les figures VI-5 et VI-6. La simulation de l'étape de dépôt du polysilicium prend en compte la contrainte intrinsèque du polysilicium déterminée expérimentalement sur la technologie développée par Philips (-500MPa).

La figure VI-5 montre la distribution des niveaux de pression hydrostatique dans l'ensemble de la structure. On constate l'apparition de zones en forte compression dans le silicium aux bords de la grille de polysilicium, alors que sous la grille, le substrat est en tension de l'ordre de 50 MPa. Aux abords du LOCOS, la distribution des contraintes est modifiée notablement par la formation de la grille. Cette nouvelle cartographie des contraintes est essentiellement due à l'apport des contraintes intrinsèques du polysilicium, puisque : i) l'oxyde de grille est suffisamment fin pour être supposé peu influent, et 2) que la composante thermique est faible étant donné que les coefficients de dilatation du silicium et du polysilicium sont voisins.



**Figure VI-5:** Profil de contraintes calculé suite à la formation des lignes de grille. Le calcul prend en compte les contraintes intrinsèques induites par le dépôt du polysilicium. Les isovaleurs correspondent à la pression hydrostatique dans la structure.

Pour vérifier la forte influence de la contrainte intrinsèque, nous avons simulé la même structure, dans les mêmes conditions, en éliminant la composante intrinsèque lors du dépôt du polysilicium (Figure VI-6).



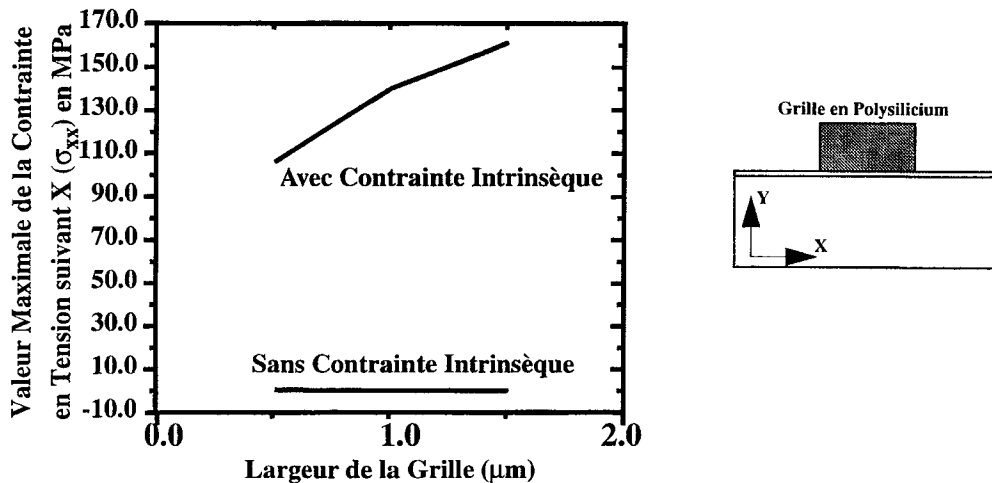
**Figure VI-6:** Profil de contraintes après la formation des lignes de grille. Le calcul ne prend pas en compte cette fois-ci les contraintes intrinsèques induites par le dépôt du polysilicium. Les isovaleurs correspondent à la pression hydrostatique dans la structure. La comparaison avec la figure VI-5 montre bien l'influence de la composante intrinsèque du polysilicium.

Le résultat de la figure VI-6 confirme bien le rôle important joué par la contrainte intrinsèque: les variations thermiques induites par la formation de l'oxyde et du polysilicium de grille font peu évoluer à elles seules la répartition des contraintes issues de l'oxydation longue (LOCOS); le silicium aux abords de la grille est dans ce cas faiblement contraint. La contrainte intrinsèque est donc le facteur de premier ordre dans la génération des contraintes mécaniques dans la structure MOS.

Une autre approche pour illustrer ce point consiste à étudier la variation de la contrainte suivant l'axe des X sous la grille, en fonction de la largeur de la grille, et donc du dimensionnel de la technologie. Dans un premier calcul, nous ne prendrons pas en compte la composante intrinsèque. On observe (Figure VI-7) dans ce cas aucune variation de la contrainte lorsque la largeur de la grille augmente. Si par contre, on inclut dans le calcul la composante intrinsèque du polysilicium telle qu'elle a été calibrée, nous obtenons une courbe de variation de la contrainte, montrant que la contrainte croît lorsque le dimensionnel augmente. Ce résultat est en parfait accord avec les mesures expérimentales effectuées par H. Miura [3].

Les étapes suivantes du procédé consistent à former les espaceurs et à réaliser les implants de source et de drain, ainsi que les recuits associés.

Les espaceurs autoalignés sont formés par un dépôt APCVD d'oxyde TEOS et par une gravure isotrope. Ces étapes génèrent d'importantes contraintes thermiques compte tenu: i) des différences de comportement thermiques entre l'oxyde et le silicium/polysilicium et ii) des différences des coefficients de rigidité de ces matériaux. La gravure de l'oxyde crée également des flancs abruptes, qui induisent d'importants pics de contraintes dans le substrat [4].



**Figure VI-7:** Effet de la largeur de la grille de polysilicium sur les contraintes dans le substrat, calculées avec et sans tenir compte de la contrainte intrinsèque du film de polysilicium. Les courbes montrent dans les deux cas la contrainte en X sous la grille.

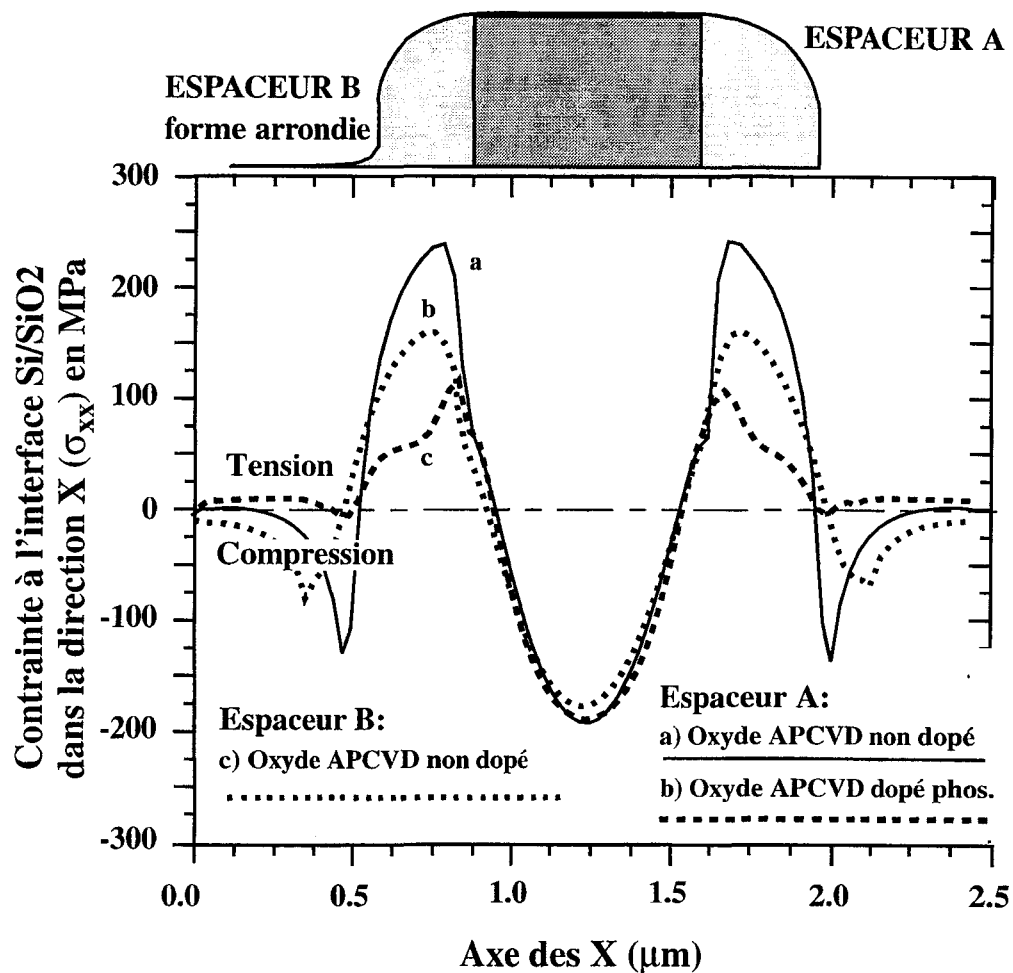
La figure VI-8a (qui se limite à l'optimisation de la zone active) donne la distribution des contraintes suivant l'axe des X ( $\sigma_{xx}$ ) dans le silicium le long de l'interface Si/SiO<sub>2</sub> après la formation des espaceurs de forme abrupte, obtenus suivant le procédé standard. On observe dans le substrat des pics compressifs élevés, situés dans le prolongement des bords des espaceurs. Ces pics entraînent par réaction la création de zones fortement tensiles sous les espaceurs.

La réalisation d'espaceurs présentant des flancs plus progressifs, par l'utilisation d'une combinaison de gravures isotropes et anisotropes permet de réduire fortement l'amplitude des contraintes dans le silicium, au niveau de l'interface. Ce résultat est donné par la courbe en pointillés (Figure VI-8b). L'amplitude des maxima compressifs observés dans le procédé de départ diminuent avec cette nouvelle forme d'espaceurs d'environ 40%. Électriquement, les travaux d'Onishi ont également conclu que le fait d'adoucir la forme des flancs des espaceurs permet de réduire les contraintes dans le substrat, au niveau des espaceurs, et par conséquent, de réduire les courants de fuite drain-substrat [4].

Enfin, l'utilisation, si le procédé le permet, d'un matériau à faible viscosité pour de faible température de dépôt, contribuera à réduire encore plus les contraintes résiduelles dans le substrat, comme le montre la seconde courbe en pointillés (Figure VI-8c) qui correspond à la fabrication des espaceurs en utilisant un oxyde APCVD dopé, présentant des caractéristiques plus favorables à la relaxation des contraintes. Ceci a été réalisé à titre d'illustration, sachant qu'un oxyde dopé n'est peut-être pas utilisable à ce stade du procédé.

Finalement, la dernière étape simulée est le dépôt TEOS (isolation entre les niveaux de métal), ainsi que les recuits thermiques de densification qui sont associés. Afin de limiter le nombre de points de maillage et ainsi de diminuer le temps de calcul, nous avons restreint le domaine de simulation dans la suite de cette étude à une demi-structure, le transistor MOS présentant une symétrie axiale.





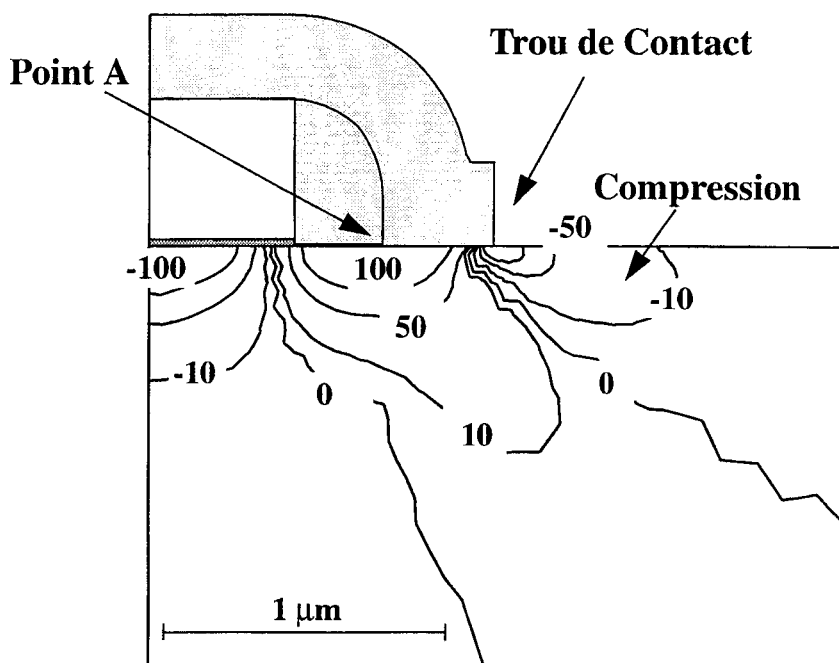
**Figure VI-8:** Distribution des contraintes le long de l'interface Si/SiO<sub>2</sub>, pour différentes formes d'espaceurs d'oxyde et différents oxydes.

Cette étape de dépôt est réalisée à 750°C, dans un four vertical et permet la formation d'une couche de 0.2 micron. Elle inclut également la densification du matériau à haute température, qui assure une stabilité de la couche lors des étapes suivantes, notamment lors des gravures des contacts de source et de drain.

La figure VI-9 présente la distribution du champ de contraintes suivant l'axe des X, dans l'ensemble de la structure, alors que la figure VI-10 donne l'état des contraintes de cisaillement.

On observe que le dépôt de la couche de TEOS engendre des contraintes élevées, notamment en cisaillement (Figure VI-10) au niveau des bords de la grille. Des valeurs indicatives supérieures à 50MPa sont calculées. Sur la figure VI-9, on observe des zones de tension, dans le silicium sur les bords de grille et d'espaceur alors que sous le polysilicium, le substrat est en compression. Le résultat montre aussi (non-visualisé sur la figure VI-9) que la grille est totalement en tension. Cet état de contrainte s'explique par le fait que l'oxyde possède un coefficient de dilatation plus faible que le poly(silicium) et que donc une fois l'oxyde déposé, celui-ci empêche le poly(silicium) de retrouver son volume initial, le laissant en état de tension. Ceci est d'autant plus important que la température de dépôt est relativement faible, ne

permettant pas d'activer le régime viscoélastique de l'oxyde. Avec un oxyde plus dopé, la relaxation des contraintes dans le polysilicium pourrait être plus importante. Sur cette dernière étape, la modification des contraintes est donc essentiellement d'origine thermique.



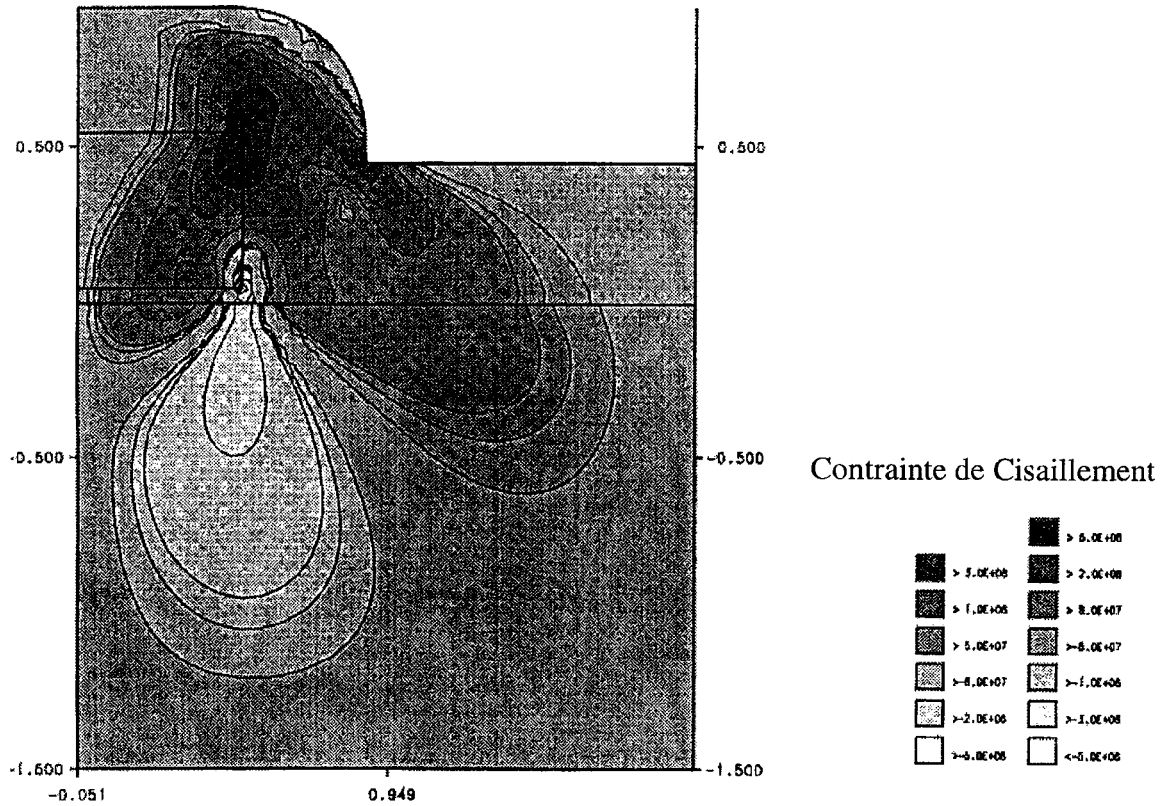
**Figure VI-9:** Résultat de la simulation en fin de procédé. Il s'agit des contraintes suivant l'axe des X. Les isovaleurs sont données en MPa. Pour des raisons de clarté du dessin, elles ne sont représentées que dans le silicium.

Etant donné l'importance de la couche de TEOS, comme isolation du premier niveau de métal avec la partie active du transistor, la réduction des contraintes mécaniques dans le substrat est envisageable en diminuant les différences entre les propriétés rhéologiques des matériaux en contact. L'utilisation d'une couche intermédiaire servant de tampon mécanique est proposée et analysée comme amélioration du procédé entraînant une diminution des contraintes mécaniques présentes à ce niveau du procédé.

Le choix du matériau servant de "tampon" doit se faire suivant plusieurs critères: d'abord le film ajouté doit contribuer à réduire les distortions des structures jointes, en améliorant les liaisons chimiques entre les matériaux. Ensuite, le matériau sélectionné doit avoir un coefficient de dilatation thermique proches de ceux des matériaux adjacents afin de réduire fortement la composante thermique. Finalement, des matériaux à faibles rigidité et viscosité contribueront à une meilleur relaxation des contraintes dans la structure. Un tel matériau répond alors aux caractéristiques d'une bonne couche tampon [5].

Les oxydes BPSG (Borophosphosilicate Glasses) dopés in situ en bore et phosphore sont de bons candidats pour être utilisés comme films tampons entre d'une part le substrat et/ou une couche de silicium polycristallin et d'autre part un film d'oxyde TEOS. Ils présentent en effet l'avantage d'être beaucoup plus visqueux, à température basse, qu'un oxyde

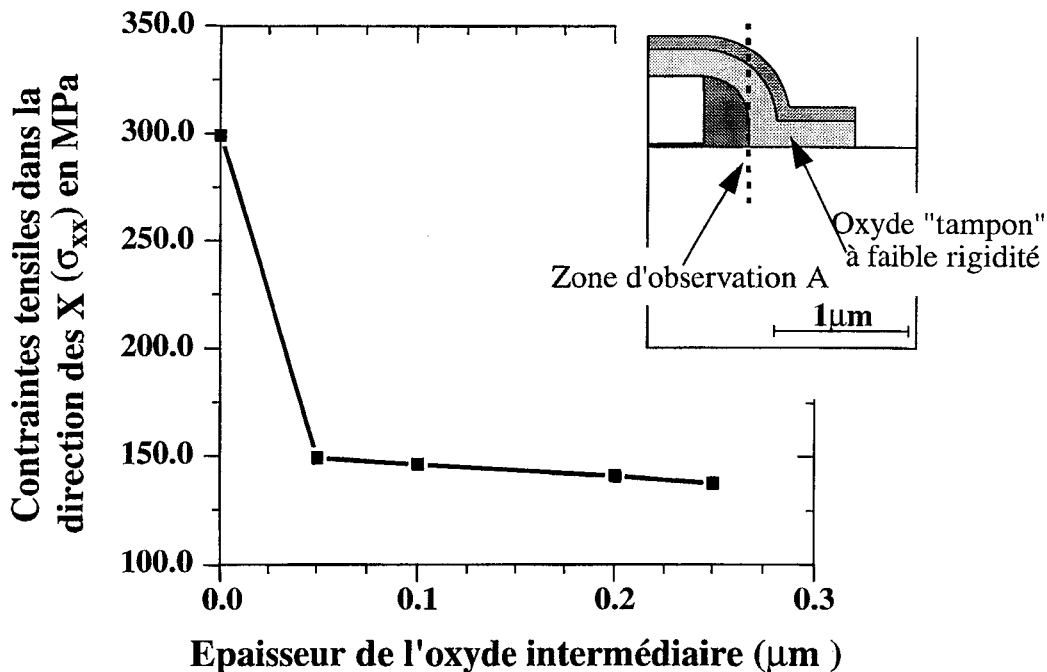
non dopé, tout en ayant le même coefficient de dilatation thermique [6] [7].



**Figure VI-10:** Contrainte de cisaillement obtenue en fin de procédé de dépôt du TEOS. La gravure des contacts n'est pas encore réalisée, permettant de parfaitement mettre en évidence la zone de cisaillement critique au bord des lignes de grille. Les isovaleurs sont données en dynes/cm<sup>2</sup>.

Ainsi, l'ajout d'une couche intermédiaire d'oxyde BPSG est étudiée, afin de quantifier la réduction des contraintes générées par cette étape du procédé. L'oxyde BPSG est déposé par PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) à 550°C avant le premier dépôt d'oxyde TEOS. L'épaisseur totale des couches de diélectrique (oxyde BPSG, oxyde TEOS 1 et 2) reste constante et égale à 0.2 micron. Des variations sur l'épaisseur de la couche de BPSG sont réalisées afin de déterminer l'épaisseur optimale.

Afin d'évaluer l'effet de cette couche intermédiaire sur le champ de contraintes dans la structure, nous prendrons comme référence la zone présentant le maximum de risque d'apparition de défauts dans le substrat. Il s'agit des bords des espaces, au niveau de l'interface Si/SiO<sub>2</sub>. En ce point, noté A sur la figure VI-11, nous observons une forte discontinuité entre les zones du silicium en tension et compression. Ceci est visible sur les composantes en X, Y et aussi sur la composante de cisaillement (Figures VI-8 et VI-10). Nous avons choisi d'analyser l'évolution de la contrainte en X en ce point A en fonction des différentes configurations de la couche BPSG intermédiaire.



**Figure VI-11:** Evolution du maximum de la contrainte en X à l'interface Si/SiO<sub>2</sub>, au point A, en fonction de l'épaisseur de l'oxyde de BPSG intermédiaire.

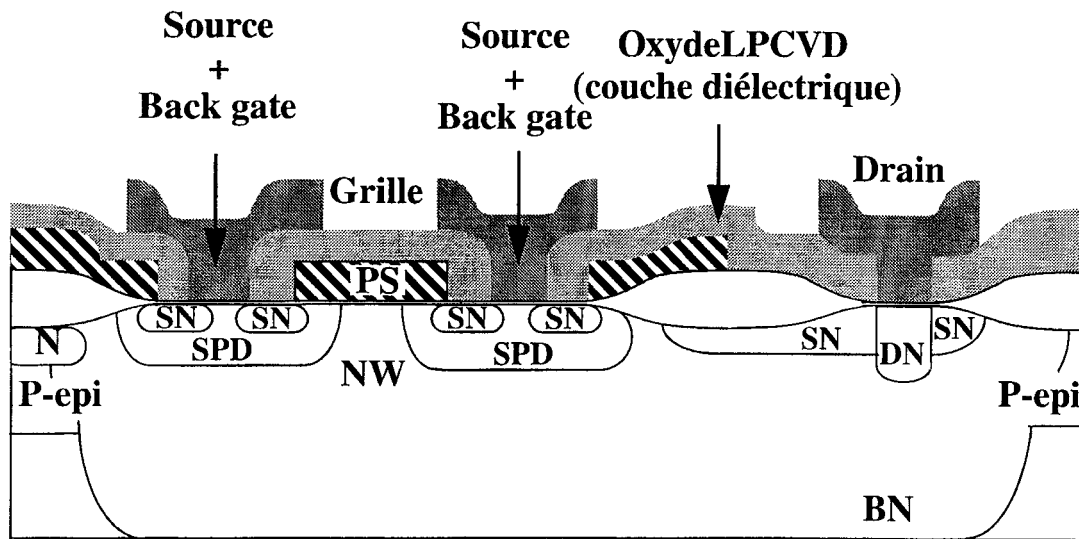
L'analyse des profils 2D de contraintes montre que plus la couche intermédiaire est épaisse plus le niveau de contrainte résiduelle dans le silicium est faible. Avec une couche d'épaisseur 0.2 micron, les pics de tension présents aux bords de la grille disparaissent quasiment. Grâce à une couche d'épaisseur 0.1 micron, il est possible de retrouver, après dépôt TEOS, une situation comparable en termes de contraintes résiduelles dans le substrat à celle avant ce dépôt. Ceci s'interprète de la manière suivante : les déformations du polysilicium au cours des variations thermiques du dépôt ne sont pas empêchées par la présence du BPSG, nettement plus visqueux à basse température et moins rigide que l'oxyde TEOS. Cet oxyde visqueux permet ainsi une plus grande relaxation des contraintes induites par le procédé. Il est intéressant de noter également que l'efficacité de la couche intermédiaire ne s'améliore pas avec des épaisseurs supérieures à 0.1 micron.

En conclusion, il est avantageux d'inclure une couche intermédiaire de BPSG avant dépôt de l'isolation TEOS, qui entraînent une diminution d'un facteur deux du pic tensile situé dans le silicium aux bords de la grille. Cependant, il est inutile que cette couche soit trop épaisse, l'efficacité de cette inter-film étant observable dès les faibles épaisseurs.

### VI.1.3-Application à la Technologie des DMOS

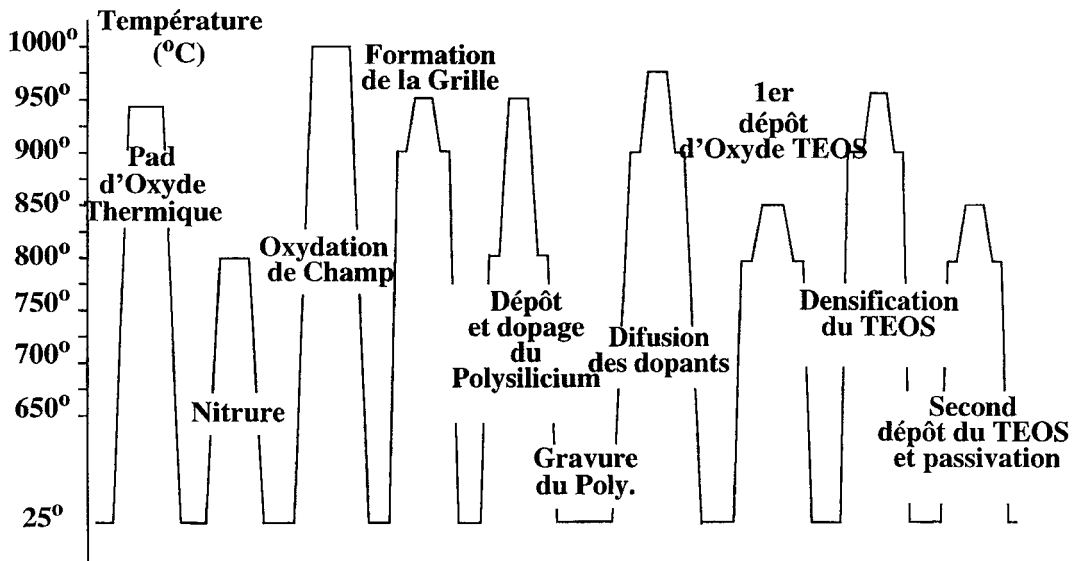
Les conclusions de l'étude sur la couche tampon de BPSG ont été appliquées au procédé de puissance DMOS de Philips à Caen, pour lequel des courants de fuite importants ont été observés et corrélés à la présence de défauts dans le silicium, résultant de la présence de contraintes mécaniques trop élevées.

Le procédé DMOS est très proche du procédé BICMOS, sur lequel nous avons effectué toute l'étude précédente. Une coupe schématique des structures est présentée sur la figure VI-12. Le descriptif du procédé est résumé sur le schéma de la figure VI-13.



**Figure VI-12:** Coupe schématique de la structure DMOS de Philips Caen.

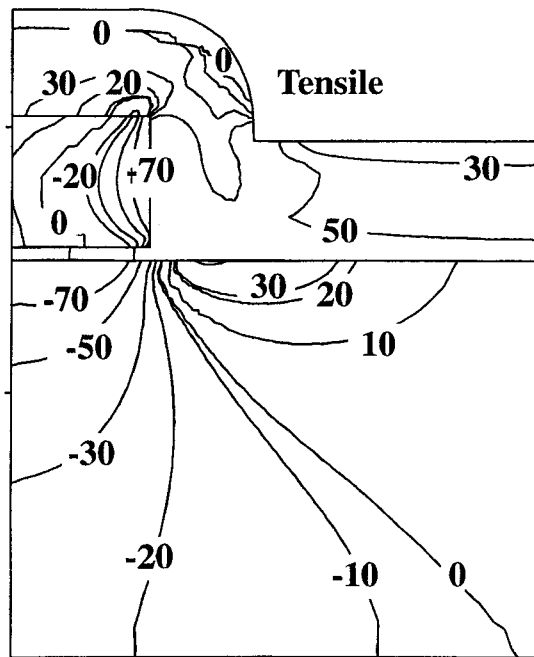
Le composant de base est constitué d'une structure d'isolation de type LOCOS de 0.7 micron d'épaisseur, d'un oxyde de grille de 50 nm, de lignes de polysilicium (intrinsèque) de 500 nm d'épaisseur, déposé par LPCVD et dopé ensuite par un implant phosphore, et finalement d'un film d'isolation TEOS de 400 nm déposé par APCVD en deux étapes, puis densifié.



**Figure VI-13:** Description des principales étapes thermiques ou induisant une modification de géométrie, dans le procédé de fabrication DMOS de Philips. Ces étapes correspondent aux étapes simulées dans cette partie.

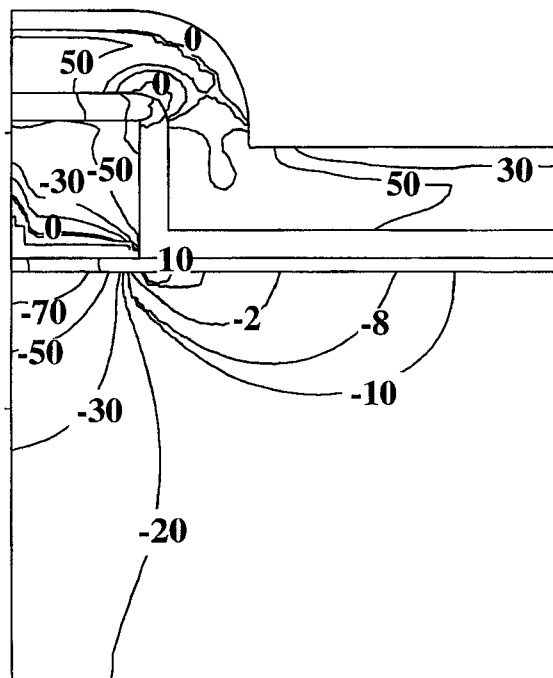
Il a été observé que le dépôt de ces deux couches de TEOS induit des contrain-

tes dans le silicium très importantes, comme le montrent la figure VI-14:



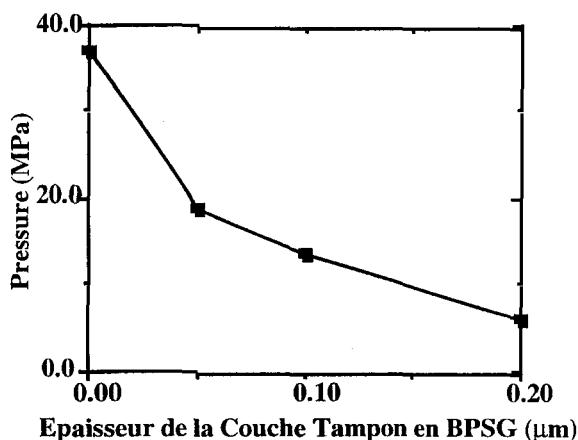
**Figure VI-14:** Distribution des contraintes dans la structure après le dépôt de la couche de TEOS. Les isovaleurs correspondent à la pression hydrostatique donnée en MPa.

L'ajout du bicouche de BPSG permet une réduction notable de ces contraintes (Figure VI-15):



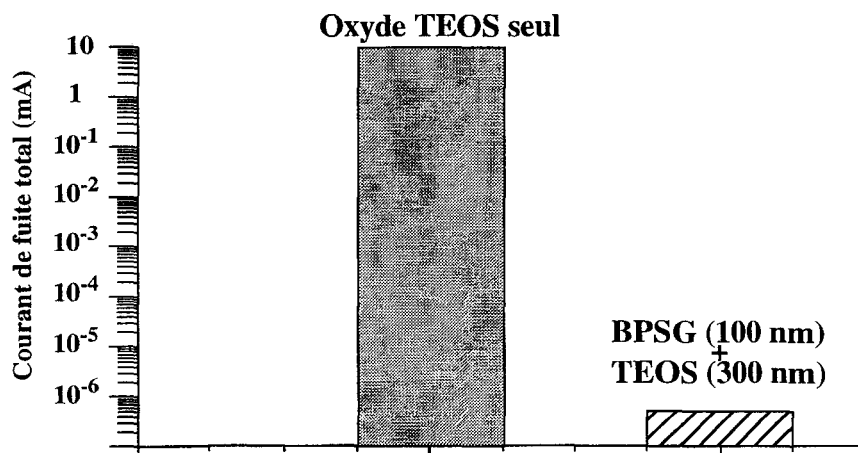
**Figure VI-15:** Distribution des contraintes dans la structure en fin de procédé. Ici, une couche de BPSG de 0.1 micron a été ajoutée avant le dépôt du diélectrique TEOS. L'épaisseur totale des films isolants reste de 0.4 micron. Les isovaleurs correspondent à la pression hydrostatique donnée en MPa.

En faisant varier l'épaisseur de BPSG dans le bicouche, tout en maintenant l'épaisseur totale des trois couches (BPSG + TEOS 1 et TEOS 2), nous observons également une réduction du pic de contraintes sur les bords de la grille. Une réduction d'un facteur quatre est ici observée pour une couche de BPSG de 0.1 micron d'épaisseur (Figure VI-16).



**Figure VI-16:** Réduction du maximum compressif dans le silicium au point de mesure A (au prolongement de la grille) pour différentes épaisseurs de couche BPSG.

Expérimentalement, des cellules ont été réalisées en incluant une couche de BPSG de 0.1 micron, dans le film diélectrique faisant au total 0.4 micron d'épaisseur. D'autres cellules ont été réalisées sans bicouche BPSG, en suivant le procédé standard. Les mesures expérimentales montrent que les dispositifs contenant la couche de BPSG ne présentent pas de défauts dans le silicium. Les courants de fuite y sont de l'ordre de 100 pA mesuré à  $V_{ds}=10$  Volts. Au contraire, les cellules ayant été réalisées avec le procédé nominal présentent dans 5% des cas des défauts dans le silicium. Sur les dispositifs issus de ces cellules, on observe des courants de fuite de l'ordre de 10mA (Figure VI-17) [8].



**Figure VI-17:** Courants de fuite mesurés dans les structures DMOS, réalisées avec ou sans couche intermédiaires de BPSG.

En conclusion, l'approche de la simulation sur ces technologies, BICMOS et DMOS, permet de mettre en évidence un certain nombre d'étapes critiques en termes de géné-

ration de contraintes mécaniques. Pour chacune de ces étapes, une étude en variations permet d'envisager des modifications à apporter au procédé pour éviter d'atteindre des niveaux de contraintes excessifs, qui se traduisent par des défauts dans le silicium, qui entraînent par la suite des problèmes d'ordre électriques (courants de fuite) ou de fiabilité. Il est bien entendu que le but de ces études n'est pas de fournir une valeur absolue du niveau des contraintes mais de permettre d'orienter plus rapidement les technologues vers les modifications ad-hoc de leurs procédés.

La deuxième application que nous nous proposons de développer maintenant concerne l'étude des contraintes mécaniques dans un procédé CMOS développé par ST Microelectronics [8]. Nos investigations se sont orientées sur les étapes de formation de la structure d'isolation PBL (PolyBuffered LOCOS) et de l'oxyde de grille. Ce travail analyse l'évolution des contraintes durant le procédé, mettant en évidence des zones dans le substrat pour lesquelles l'apparition de déformations plastiques est très probable. Le phénomène observé de réduction de l'épaisseur de grille au niveau du coin de la structure PBL est également analysé. Une explication basée sur la présence de contraintes résiduelles dans le silicium, issues de toutes les étapes antérieures du procédé est avancée qui permet de prédire l'apparition ou non de cet amincissement.

## VI-2 Analyse des Contraintes dans un Procédé CMOS

Ce travail a été initialisé par ST-Microelectronics qui a observé un phénomène d'amincissement de l'oxyde de grille aux coins des structures d'isolation, zones où de fortes contraintes sont mesurées. Notre étude doit permettre de mettre en évidence les étapes les plus critiques en termes de génération de contraintes mécaniques et les zones dans la structure qui risquent d'être les plus endommagées. Nous avons adopté pour le silicium le modèle rhéologique élasto-plastique décrit dans ce travail, qui nous permet de déterminer les régions du substrat pour lesquelles le seuil de plasticité risque d'être atteint.

Rappelons que la contrainte équivalente, en 2D, au sens de Von-Mises, qui peut-être utilisée comme seuil de plasticité est :

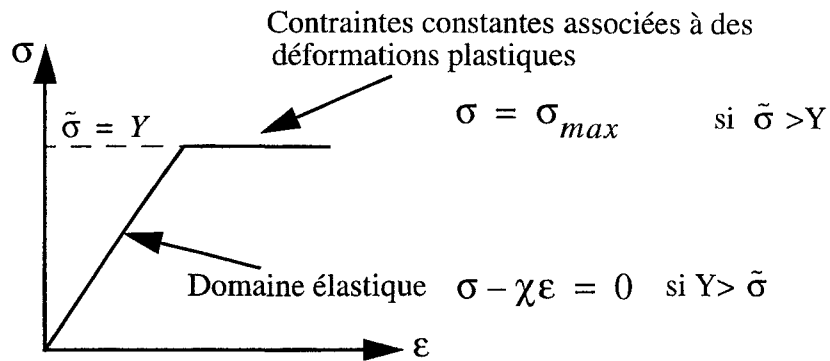
$$\sqrt{3 \left( \frac{(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + \sigma_{xx}^2 + (\sigma_{yy})^2}{6} + (\sigma_{xy})^2 \right)} = \tilde{\sigma}$$

où  $\sigma_{xx}$ ,  $\sigma_{yy}$  sont les composantes normales suivant X et Y, respectivement et  $\sigma_{xy}$  et la composante de cisaillement.

Lorsque  $\tilde{\sigma}$  devient supérieur au seuil de plasticité du silicium (Y), qui est pris égal à 2E9 dynes/cm<sup>2</sup> dans ce travail, alors des déformations plastiques apparaissent localement dans le substrat. Le silicium est localement modélisé comme un solide elasto-plastique simple (Figure VI-18). Il est évident que l'apparition et l'extension de ces zones plastiques dépend de la valeur de Y qui n'est pas connue expérimentalement parce que fonction de très



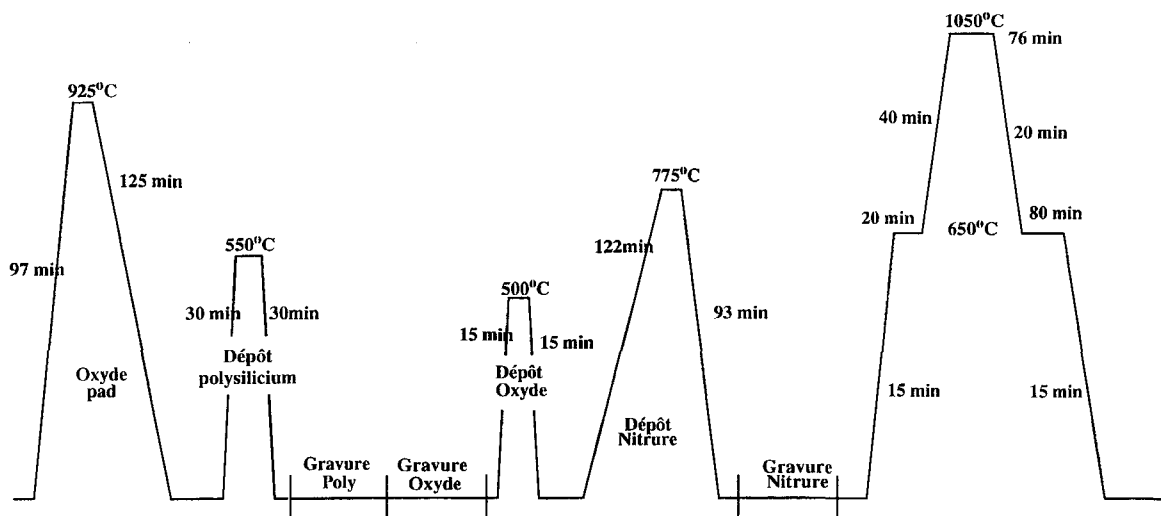
nombreux paramètres (orientation du substrat, contrainte résiduelle, historique des étapes,...)



**Figure VI-18:** Comportement élasto-plastique pour un solide ayant une limite élastique  $Y$ .

### VI.2.1-Descriptif des Etapes du Procédé

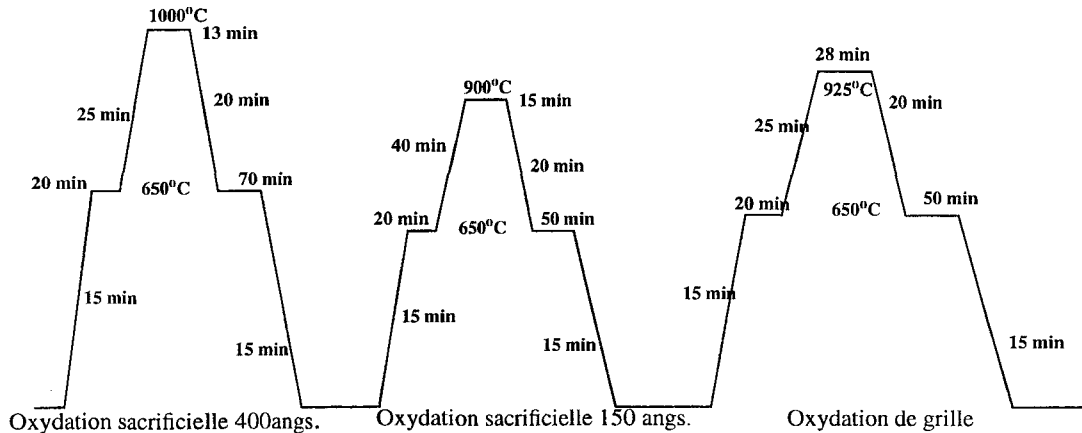
Le procédé est décrit schématiquement aux figures VI-19 et VI-20:



**Figure VI-19:** Schéma descriptif des étapes du procédé de formation de la structure d'isolation [8].

Initialement, le substrat de silicium est supposé n'avoir aucune contrainte résiduelle. La première étape consiste à former les différentes couches et ouvertures nécessaires à l'oxydation de champs pour la structure PBL. Pour cela un oxyde de 12 nm est réalisé à 950°C, suivi d'un dépôt LPCVD de polysilicium de 50nm à 550°C. Une gravure sèche de ces deux films permet de définir les zones isolantes des zones actives. Ensuite un film de nitrure LPCVD de 0.16 micron est déposé à 775°C et gravé pour former l'empilement final. Pour des raisons de simplification de la mise à jour de la géométrie au cours de l'étape d'oxydation [10], un film artificiel d'oxyde (d'épaisseur 10 Angstroms) est intercalé entre le nitrure et le polysilicium. Les vitesses de montée et descente en température sont précisées sur la figure VI-19. A chaque dépôt, les contraintes intrinsèques du film en formation sont incluses dans le calcul. Pour le

nitruire, nous avons considéré une contrainte tensile de 800MPa, plus en accord avec les mesures faites sur ce genre de films à ST-Mircoelectronics. Des variations sur les dimensions du masque définissant les zones isolantes ont été réalisées afin d'analyser le phénomène d'amincissement de l'épaisseur centrale de l'oxyde de champ. Cette oxydation de champ est réalisée dans un four vertical avec un procédé humide à 1050°C, pendant 75 minutes, pour obtenir une épaisseur finale de 0.7 micron.



**Figure VI-20:** Schéma descriptif des étapes du procédé post formation de l'isolation PBL : oxydations sacrificielles et oxydation de grille [8].

La deuxième série d'opérations (Figure VI-20) consiste à enlever les couches de nitruire, de polysilicium et oxyde, par différentes gravures à température ambiante, à nettoyer la surface du silicium dans les zones actives et adoucir les formes de l'oxyde de champ par des oxydation sacrificielles des tranches de silicium. Ces oxydations servent également de couches tampons aux implants des puits N et P et des implants d'ajustement des tensions de seuil. Des variations sur ces étapes d'oxydations sacrificielles ont été investiguées afin de mettre en évidence leur contribution sur les champs de contraintes résiduelles observé en fin de fabrication. Finalement, nous avons simulé l'oxydation de grille. Il s'agit d'une oxydation sèche, à 925°C pendant 18 minutes, pour former 0.12 nm d'oxyde. Nous avons analysé l'amincissement de cet oxyde en fonction du niveau des contraintes présentes dans le silicium.

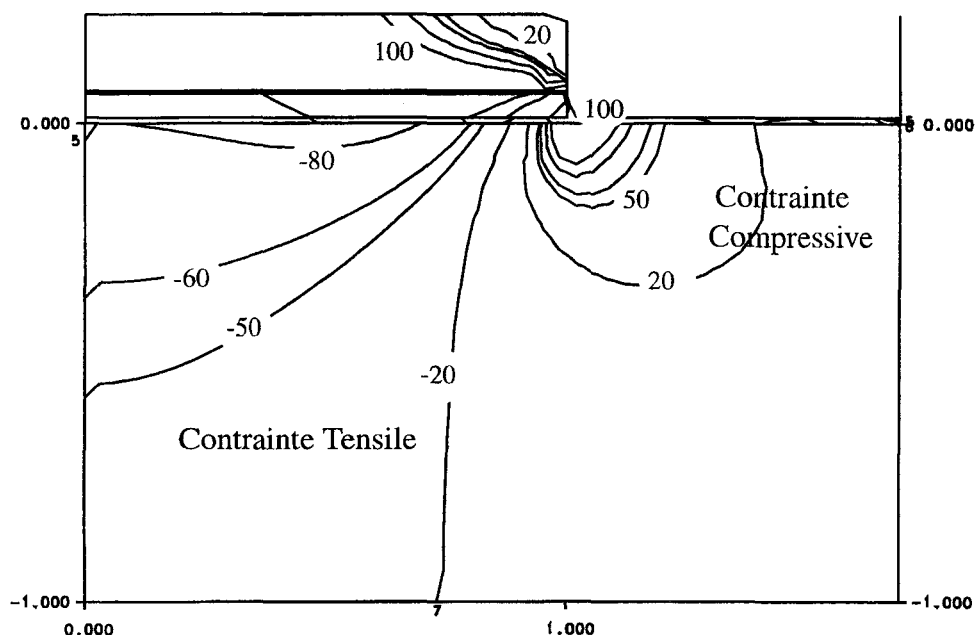
Pour minimiser les temps de calculs, nous n'avons étudié qu'une demi structure sur laquelle il est possible d'obtenir une densité de points de maillage suffisante pour garantir la précision des calculs.

### **VI.2.2-Contrainte Induite par la Formation de l'Empilement du PBL**

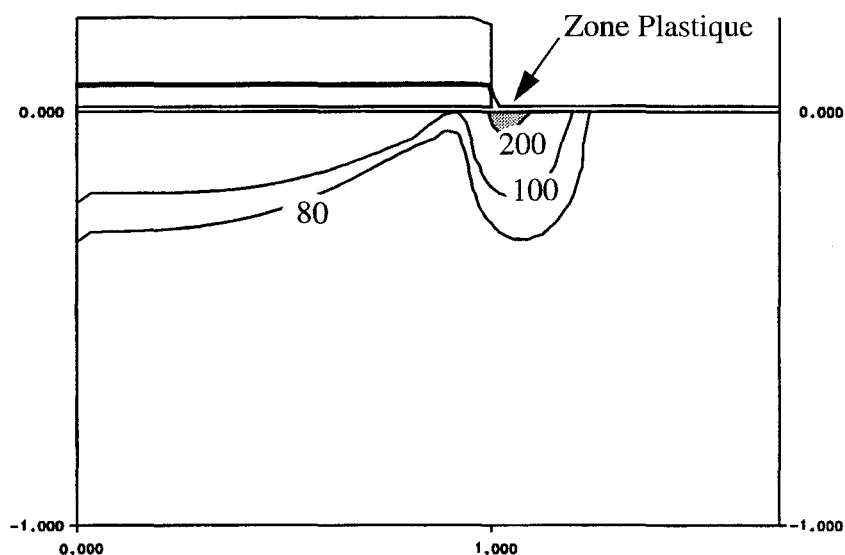
Dans cette première partie nous analysons les contraintes induites par les différentes étapes nécessaires à la formation du PolyBuffered LOCOS. Les contraintes intrinsèques des couches déposées de polysilicium et nitruire sont considérées respectivement égales à 500MPa en compression et 800MPa en tension.

Après les différents dépôts et gravures nécessaires à la formation de l'empile-

ment du PBL, le substrat présente une zone tensile, sous les couches de polysilicium et nitrure. La future zone d'isolation est relativement libre, excepté aux extrémités sur lesquelles les gravures du masque OD induit un pic en compression dû aux effets de bords. La figure VI-21 présente le résultat de la simulation, juste avant l'oxydation de champ.



**Figure VI-21:** Champ de pression hydrostatique dans le silicium, avant l'oxydation PBL. Les isovaleurs sont données en MPa.

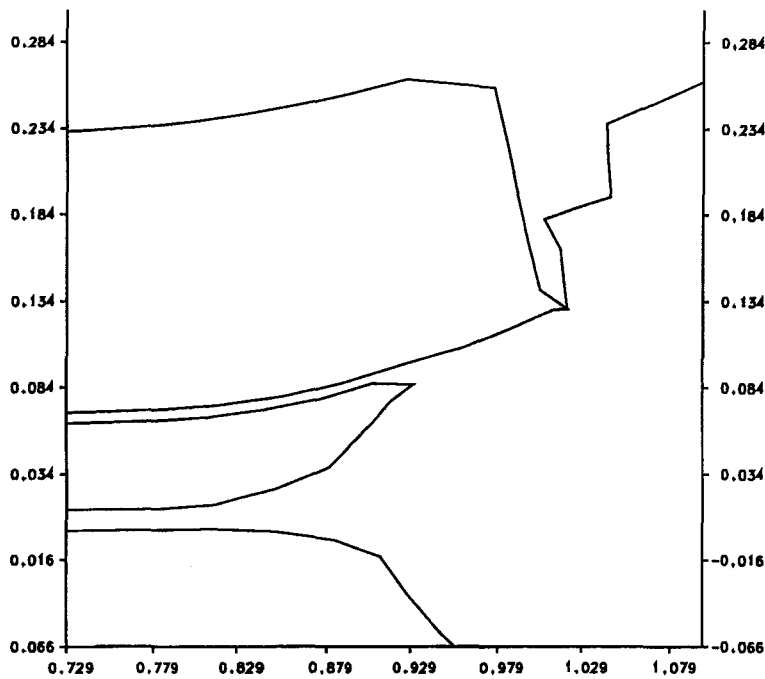


**Figure VI-22:** Répartition de la contrainte équivalente dans le silicium, avant l'oxydation PBL. Les isovaleurs sont données en MPa. La partie grisée correspond à la zone où le modèle de plasticité est activé.

En termes de contraintes équivalentes de Von Mises dans le silicium, il apparaît que le substrat présente une signature semblable. La figure VI-22 donne la distribution de la contrainte équivalente dans le substrat. La zone hachurée représente les éléments du maillage

ayant dépassé le seuil de plasticité du silicium, fixé à 200 MPa. On note que seuls quelques points dans la structure sont dans ce cas.

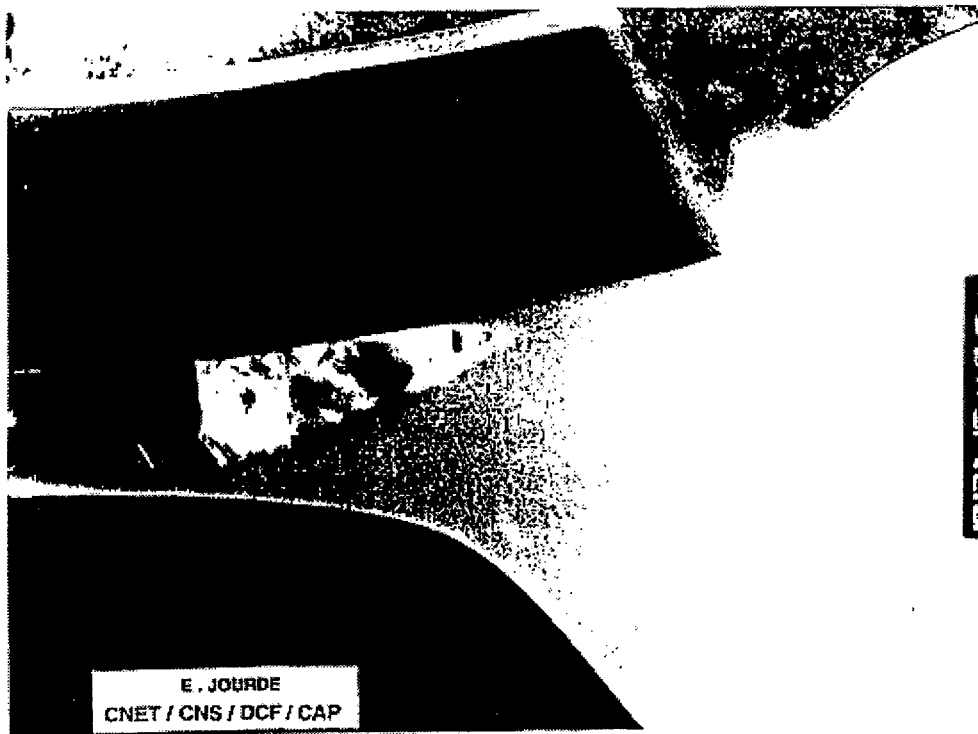
L'étape suivante consiste à réaliser l'oxydation de champ. Dans cette étape, les variations thermiques mises en jeu pour atteindre la température d'oxydation sont simulées, comme décrites à la figure VI-19. La figure VI-23 donne une vue détaillée de la forme calculée du bec d'oiseau. La figure VI-24 permet de visualiser le bon accord entre le calcul et l'expérience, grâce à la photographie SEM du bec d'oiseau.



**Figure VI-23:** Résultat de simulation de l'oxydation PBL. Vue détaillée de la zone du bec d'oiseau, permettant la comparaison avec les observations SEM.

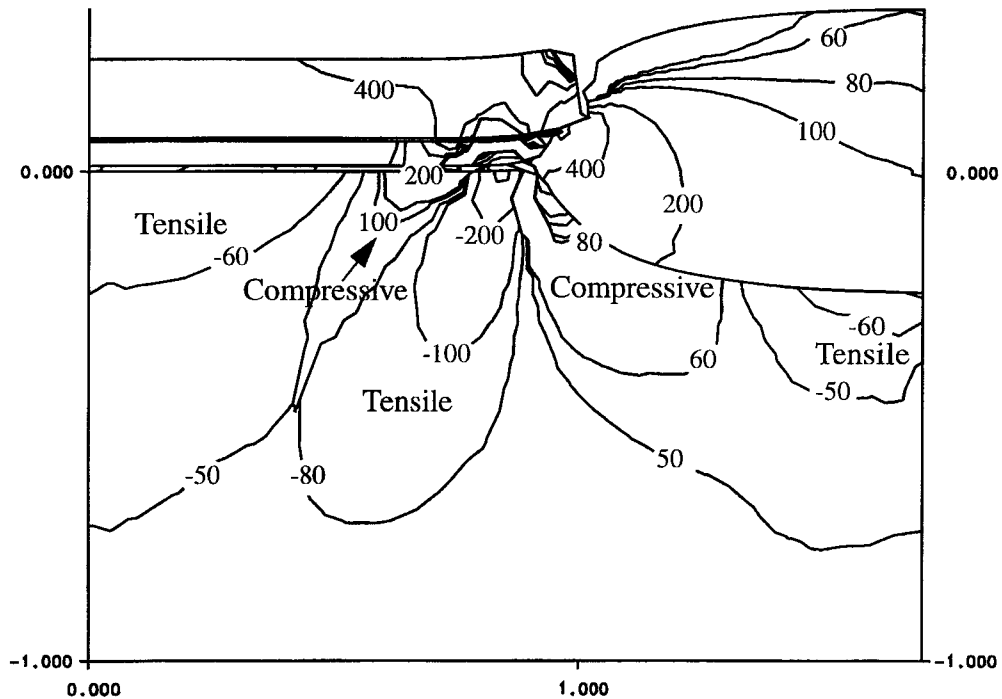
Pour d'obtenir ces bons accords, il a fallu considérer que le comportement rhéologique du polysilicium, qui était jusque là considéré comme élastique (comme le silicium), est de nature viscoélastique (Maxwell). Les raisons de cette modification tiennent dans le fait que des observations ont montré que l'oxydation du polysilicium se fait de façon privilégiée au niveau des joints de grain. La réaction d'oxydation augmente le volume des joints de grain [11], créant ainsi une contrainte compressive, qui se relaxe à haute température à travers le fluage de l'oxyde créée dans les joints [11]. Ainsi un modèle viscoélastique permet de mieux reproduire cette relaxation. Les meilleurs résultats de simulation sont obtenus dans ce travail avec une viscosité de  $5E13$  poises pour le polysilicium à  $1050\text{ }^{\circ}\text{C}$  alors que pour l'oxyde, elle vaut  $7E13$  poises. Il est à noter que nous aurions pu adopter un modèle viscoélastique non linéaire, en introduisant une viscosité non linéaire, dépendante du niveau de contraintes résiduelles dans le matériau. Ceci aurait pu rendre compte de certains phénomènes locaux observés lors de l'oxydation du polysilicium, qui se traduisent macroscopiquement par une diminution de la viscosité [12]. Il aurait été alors absolument nécessaire de considérer l'ensem-

ble des sources de contraintes afin d'avoir une composante résiduelle aussi fiable que possible. Ceci n'a pas été jugé nécessaire dans ce travail, compte tenu des bons résultats obtenus avec un modèle linéaire. Cependant, il est intéressant de noter que ces mécanismes complexes, observés localement, peuvent être pris en compte par des modèles macroscopiques développés au cours de ce travail. La complexité du modèle choisi dépend bien évidemment de la finesse des résultats attendus, de la calibration disponible et des moyens en temps et puissance de calcul mis en oeuvre.

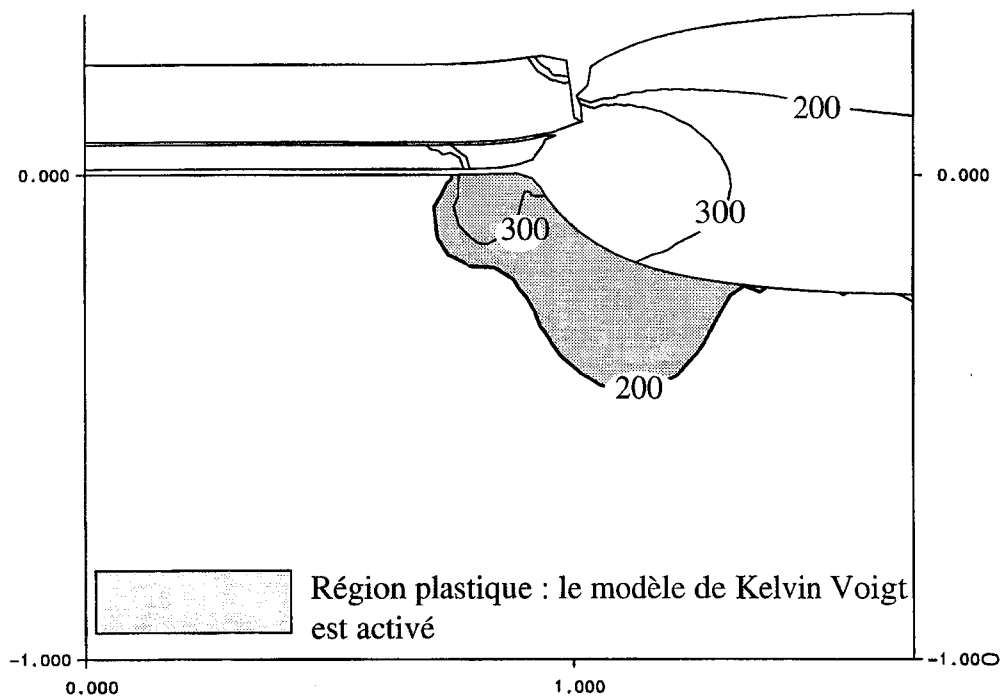


**Figure VI-24:** Photo SEM de la structure PBL du procédé CMOS 0.35 micron de ST-Microelectronics. Vue détaillée du bec d'oiseau [9].

La figure VI-25 donne la distribution de la pression hydrostatique dans la structure. On observe deux pics compressifs et trois zones fortement tensiles dans le substrat. Les pics tensiles sont les plus critiques, notamment celui situé sous le bec d'oiseau, qui atteint une valeur de 400 MPa. Ces pics sont susceptibles de provoquer des défauts dans le silicium. La figure VI-26 donnant la répartition de la contrainte équivalente montre que la zone plastique dans le substrat s'est élargie fortement par rapport au résultat précédent (Figure VI-22), avec un maximum à 300 MPa au niveau du bec d'oiseau. On va s'apercevoir dans la suite du procédé que l'étape d'oxydation du PBL est celle qui contribue majoritairement à l'extension de la zone plastique dans le substrat.

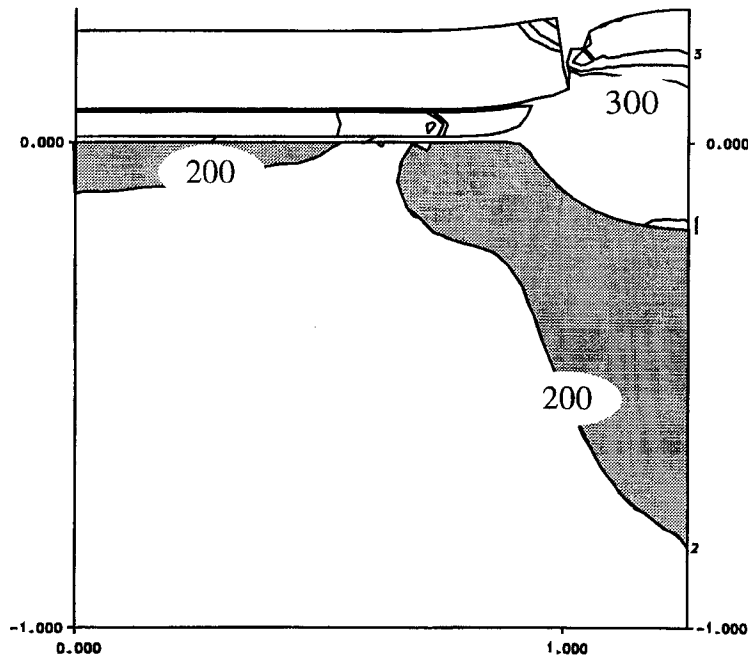


**Figure VI-25:** Cartographie de la pression hydrostatique en fin d'oxydation de champ du PBL. Les contraintes sont données lorsque la structure est revenue à température ambiante. Les isovaleurs sont exprimées en MPa.

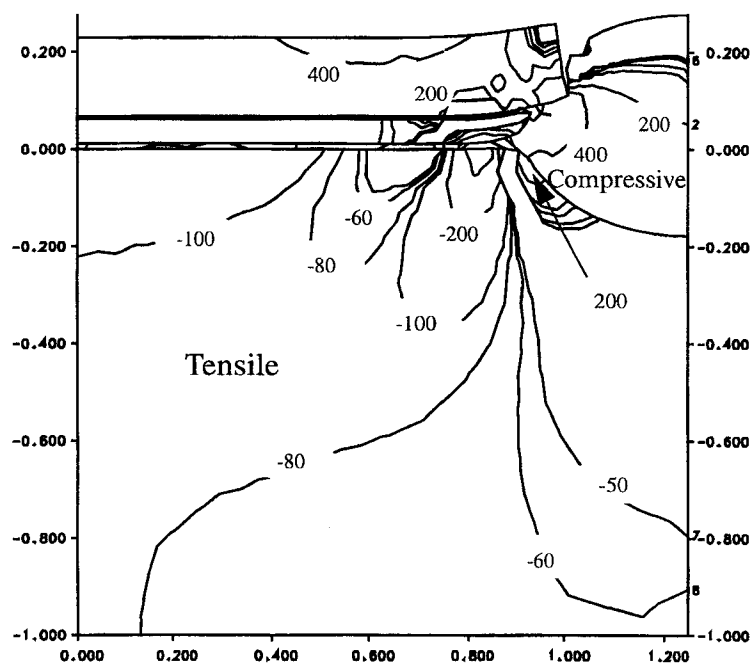


**Figure VI-26:** Evaluation des contraintes équivalentes en fin de formation du PBL. La zone hachurée correspond à la zone plastique. Les isovaleurs sont exprimées en MPa.

Si l'on diminue le dimensionnel de l'ouverture du masque d'isolation, afin d'accroître la densité sur la tranche, on note une très forte extension de la zone plastique sous l'oxyde épais (Figure VI-27). Le substrat sous l'oxyde de champs passe presque entièrement dans un régime élastoplastique, augmentant donc la probabilité d'apparition de défauts dans le substrat. L'augmentation des contraintes résiduelles est également parfaitement visible lorsqu'on calcule la pression hydrostatique (Figure VI-28). Les contraintes sont données à la température ambiante, après la descente en température suivant l'oxydation.



**Figure VI-27:** Distribution de la contrainte équivalente sur la structure obtenue avec une ouverture de masque d'isolation de 0.5 microns.



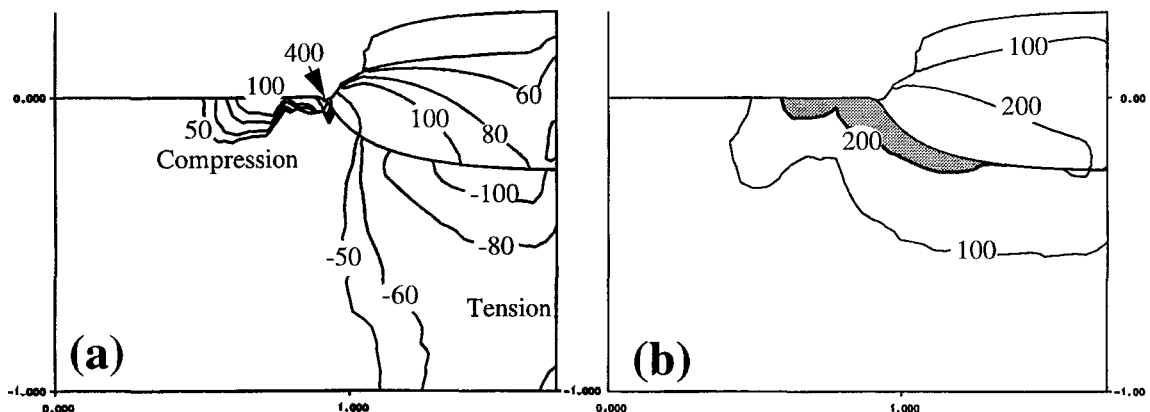
**Figure VI-28:** Résultat de simulation de la structure obtenue avec une ouverture de masque d'isolation de 0.5 micron. Les isovaleurs correspondent à la pression hydrostatique en MPa. Les coordonnées sont données en microns.

En conclusion, on peut souligner dans cette première partie que l'étape d'oxydation longue (LOCOS) est à priori celle qui génère le plus de déformations plastiques dans le substrat. Une réduction des dimensionnels du masque d'isolation semble amener une forte augmentation des contraintes dans le silicium, et s'accompagnera sûrement de la formation de défauts dans le substrat.

### *VI.2.3-Distribution des Contraintes après la Suppression des Films de Nitrure et de Polysilicium*

Nous allons maintenant déterminer les niveaux de contraintes après la suppression des films de nitrure et de polysilicium ayant servi de masque à l'oxydation de champ. Les couches de nitrure puis de polysilicium sont gravées à température ambiante par gravure sèche. Après chaque étape, l'équilibre mécanique est recalculé. Le silicium est, à la fin de ces étapes, mis à nu dans les zones actives. Par la suite, sur ces zones actives, l'oxyde de grille sera formé.

La figure VI-29a donne la distribution de la pression hydrostatique à la fin de ces gravures successives. La figure VI-29b montre les zones sur lesquelles le seuil de plasticité est dépassé.



**Figure VI-29:** a) Contraintes résiduelles dans la structure PBL après gravure des couches de nitrure et de polysilicium. Le silicium est mis à nu dans la zone active. Les isovaleurs correspondent à la pression hydrostatique en MPa; b) Distribution de la contrainte équivalente montrant en hachuré les zones plastiques dans le substrat.

Nous pouvons noter plusieurs points intéressants sur ces figures.

Premièrement, on peut observer que les pics tensiles au centre du masque d'oxydation et sous le bec d'oiseau sont fortement diminués. Ceci indique que le silicium se comporte élastiquement dans ces zones où effectivement le seuil de plasticité n'a pas été atteint. C'est pourquoi la relaxation des contraintes y est instantanée. On peut également noter la diminution des contraintes dans l'oxyde, qui devient moins compressif. En effet, en enlevant les films de nitrure et de polysilicium, l'oxyde épais peut relaxer les contraintes auxquelles il était



soumis et prendre plus de volume. Cette relaxation de l'oxyde entraîne par réaction une augmentation des contraintes tensiles dans le substrat sous l'oxyde. Ceci doit être pris en compte dans l'optimisation du procédé, par exemple en diminuant les épaisseurs des films définissant l'empilement (polysilicium et nitrure), puisque des contraintes tensiles sont généralement à l'origine de défauts.

Deuxièmement, on observe que dans la région du bec d'oiseau la relaxation des contraintes du substrat est extrêmement faible bien que la charge que créaient les couches de nitrure et de polysilicium ait disparue. Cette zone correspond à l'endroit où le seuil de plasticité a été dépassé lors de l'oxydation de champ où un effet post-élastique existe. Cependant, malgré cet effet, on remarque que le maximum de pression dans cette zone plastique diminue de 400MPa à 100MPa. Ceci s'explique par la composante de déviation du tenseur des contraintes qui dans le cas du silicium adopte la loi linéaire de Hooke et permet de relaxer instantanément une partie des contraintes.

A ce stade du procédé de fabrication, on peut conclure qu'il existe deux problèmes importants lors de la formation du PBL. Le premier correspond à l'existence d'un pic de compression dans la zone active qui risque de perturber les étapes suivantes du procédé. Pour le réduire, il est conseillé de réduire l'épaisseur du masque d'oxydation au détriment de la longueur du bec d'oiseau. Le second problème correspond à l'existence du pic tensile sous l'oxyde de champ qui peut être réduit par diminution de l'épaisseur de cet oxyde de champ.

La suite du procédé est constituée des différentes oxydations sacrificielles, avant la formation de l'oxyde de grille. Ces oxydations sacrificielles sont mises en place afin de nettoyer la structure silicium dans les zone active.

#### ***VI.2.4-Simulation des Oxydations Sacrificielles avant Formation de la Grille***

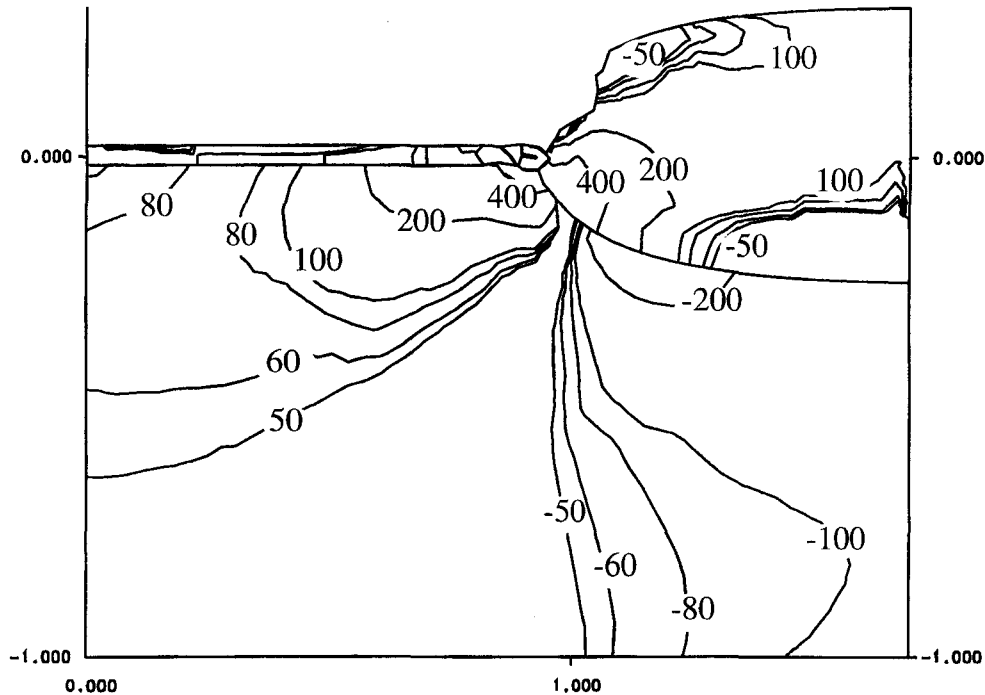
Le procédé est décrit en détail dans la première partie de cette section VI.5. Il s'agit d'une première oxydation en ambiance humide à 1000°C qui permet de faire croître entre 420 et 450 Angstroems d'oxyde thermique. Cet oxyde est enlevé ensuite par gravure humide (DHF ou BHF), à température ambiante, avec un temps de sur-gravure permettant de graver 500 Angstroems sur tranche témoin. Une seconde oxydation fine de 150 Angstroems est ensuite réalisée à 900°C, suivie de sa désoxydation, également réalisée par gravure humide (DHF ou BHF), avec une sur-gravure d'environ 50 Angstroems. Cette dernière couche d'oxyde mince (150 A) peut servir également de couche tampon aux l'implantations des caissons et implants d'ajustement de la tension de seuil. A la fin de ces oxydation/désoxydation successives, l'oxyde de grille est formé.

Une alternative à cette partie du procédé consiste à supprimer la première oxydation sacrificielle. Ceci semble d'autant plus intéressant que cette réoxydation, qui est sensée parfaitement nettoyer la surface du silicium, et éliminer ainsi toutes les barrières à l'oxydation de la grille, semble être peut efficace aux vues des réductions d'épaisseur de l'oxyde de grille encore observés [13] [9]. Nous soupçonnons que ce phénomène d'amincissement de l'oxyde de grille est imputable à un niveau trop élevé des contraintes résiduelles dans le substrat, qui entraîne une diminution de la cinétique d'oxydation dans ces zones.

Nous nous proposons dans la suite d'évaluer l'évolution des contraintes dans la

structure au cours de ces réoxydations successives, et d'analyser l'avantage ou l'inconvénient de n'utiliser qu'une seule oxydation sacrificielle.

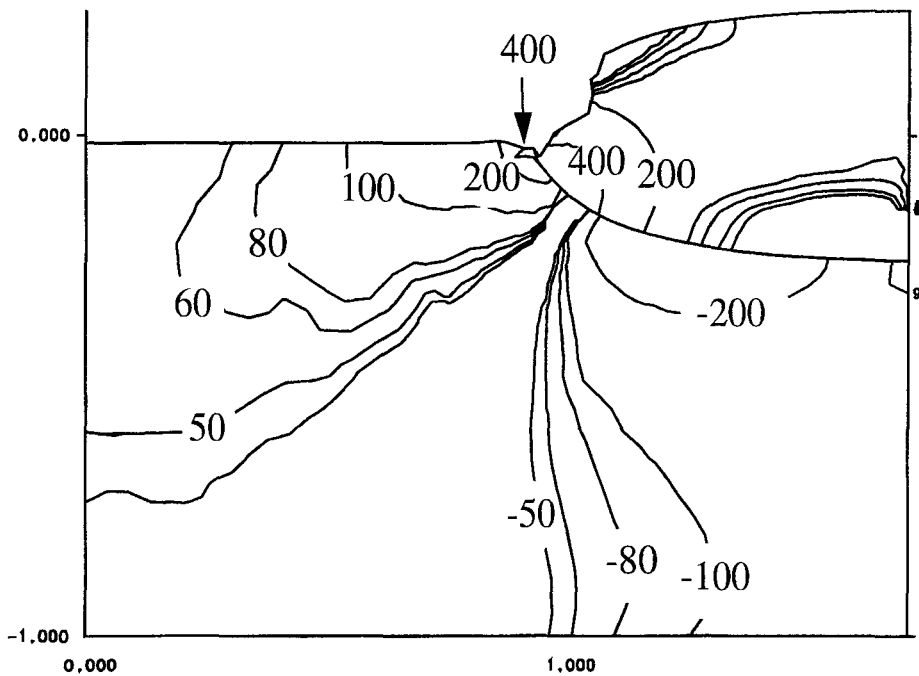
La figure VI-30 donne la cartographie de la pression hydrostatique dans la structure après la première réoxydation. L'épaisseur d'oxyde simulée est de 375 Angstroems. Il apparaît clairement une augmentation des contraintes dans le silicium, notamment dans la zone du bec d'oiseau.



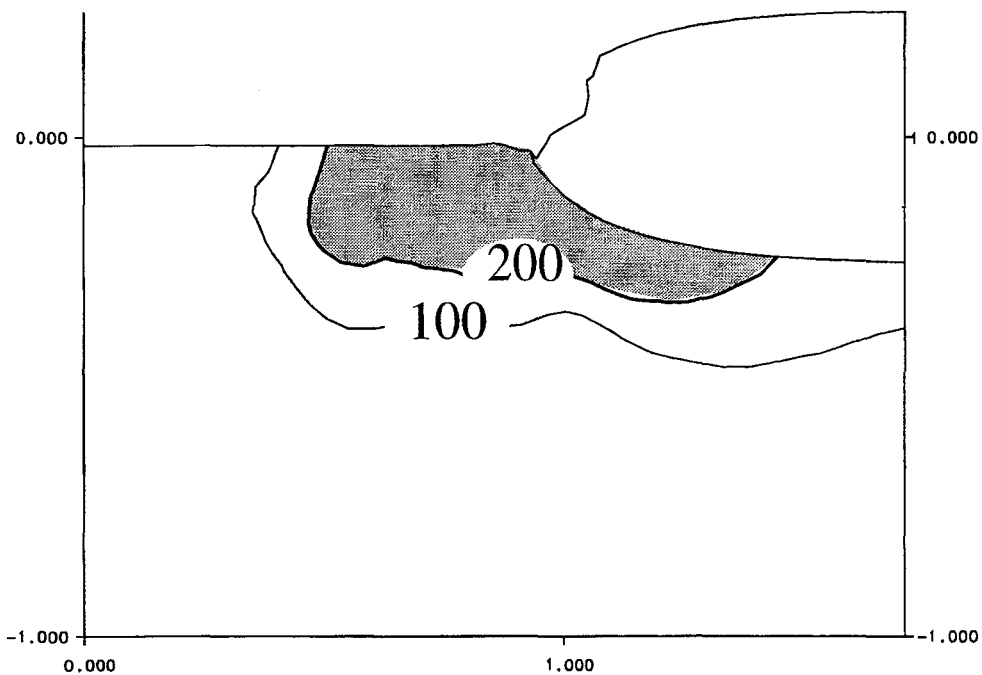
**Figure VI-30:** Simulation de la pression hydrostatique à la fin de la première réoxydation de 400 Å. Les isovaleurs sont en MPa. Les coordonnées sont données en microns.

Le pic compressif observé est légèrement relaxé avec la gravure de l'oxyde sacrificiel, comme on peut l'observer sur la figure VI-31. Cependant le proche voisinage du bec d'oiseau reste fortement en compression, puisque dans cette zone le silicium est en régime plastique et donc la relaxation des contraintes est ainsi fortement ralentie. De plus, la présence de ces contraintes plastiques agit comme charge vis à vis des régions élastiques, y induisant d'autres contraintes, ce qui explique une relaxation plus faible que ce qui pourrait être attendu, même dans les régions élastiques. La figure VI-32 définit l'extension de la zone plastique calculée suivant la modélisation et le critère que nous avons adopté, et donne ainsi la limite entre les comportements élastique et plastique dans le silicium.

Ainsi, cette première séquence de ré-oxydation et gravure tend à augmenter de manière non négligeable les contraintes résiduelles dans le substrat et augmente légèrement l'extension de la zone plastique et donc la probabilité de créer des défauts dans le substrat.



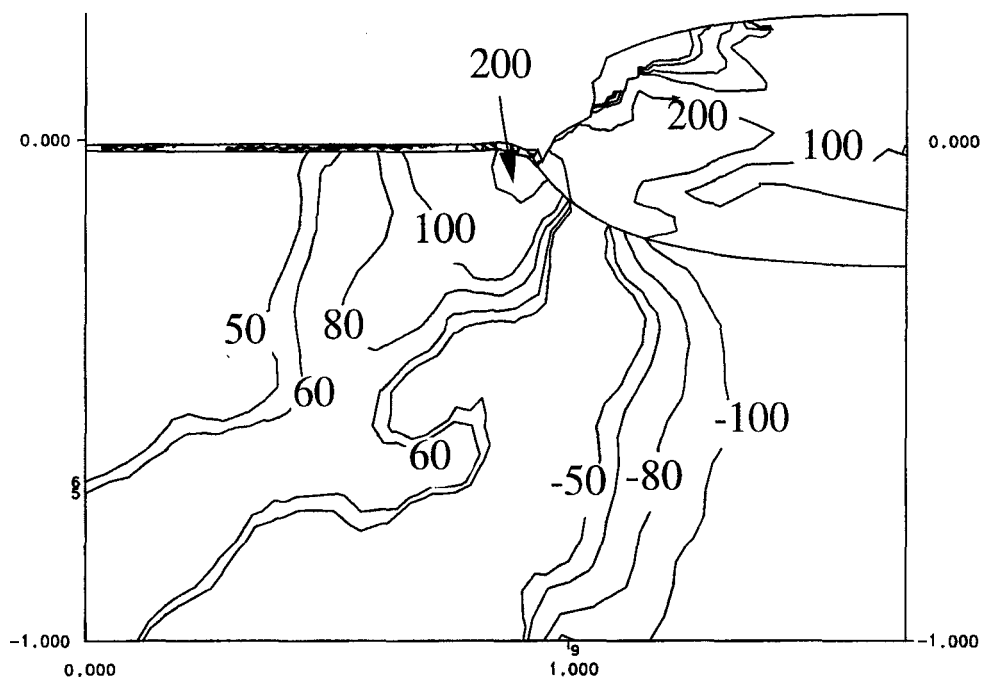
**Figure VI-31:** Distribution de la pression hydrostatique après gravure de l'oxyde sacrificiel. Malgré la suppression de la charge que constituait cet oxyde sacrificiel, le silicium reste fortement en compression.



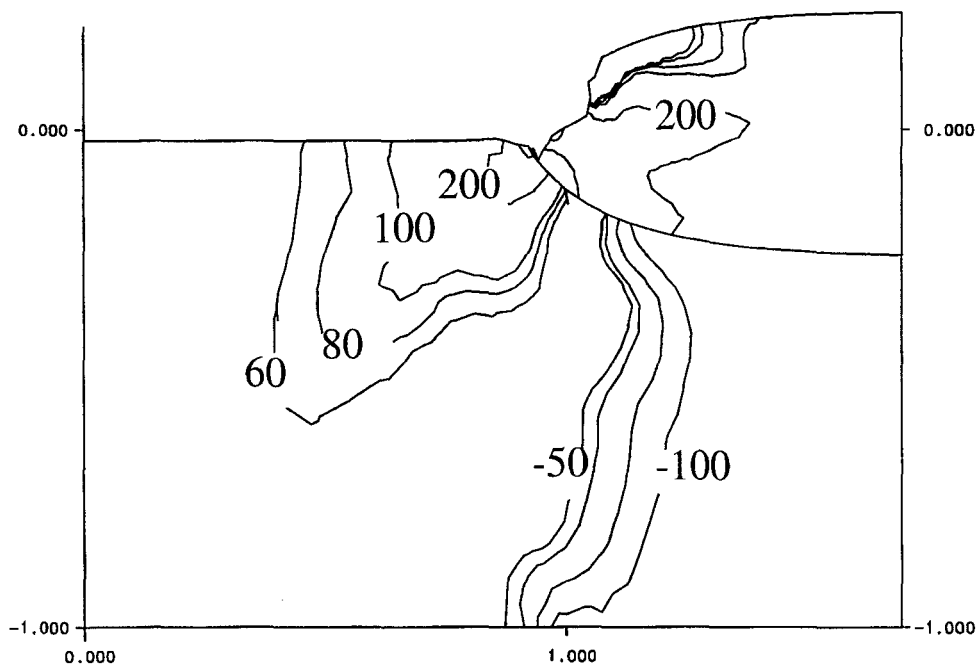
**Figure VI-32:** Extension de la zone plastique dans le silicium, en fin de gravure de l'oxyde sacrificiel. Dans la région hachurée, le régime plastique est activé. Le seuil de plasticité est pris égal à 200MPa.

La figure VI-33 montre que la seconde réoxydation qui permet de former un oxyde de 125 Angstroems, n'induit pas de changement notable dans le champ des contraintes

du silicium. Si l'on compare les figures VI-33 et VI-31, on n'observe pas de véritable détérioration de la situation en termes de contraintes. L'oxydation crée un film suffisamment faible pour ne par réellement induire une charge supplémentaire. De même, après la gravure de ce film, le profil de contraintes reste pratiquement inchangé par rapport à la situation avant la séquence d'oxydation et de déoxydation. La zone plastique dans le silicium reste donc également inchangée (Figure VI-34).



**Figure VI-33:** Résultat de la simulation après l'oxydation sacrificielle de 150A. Les isovaleurs correspondent à la pression hydrostatique (en MPa).

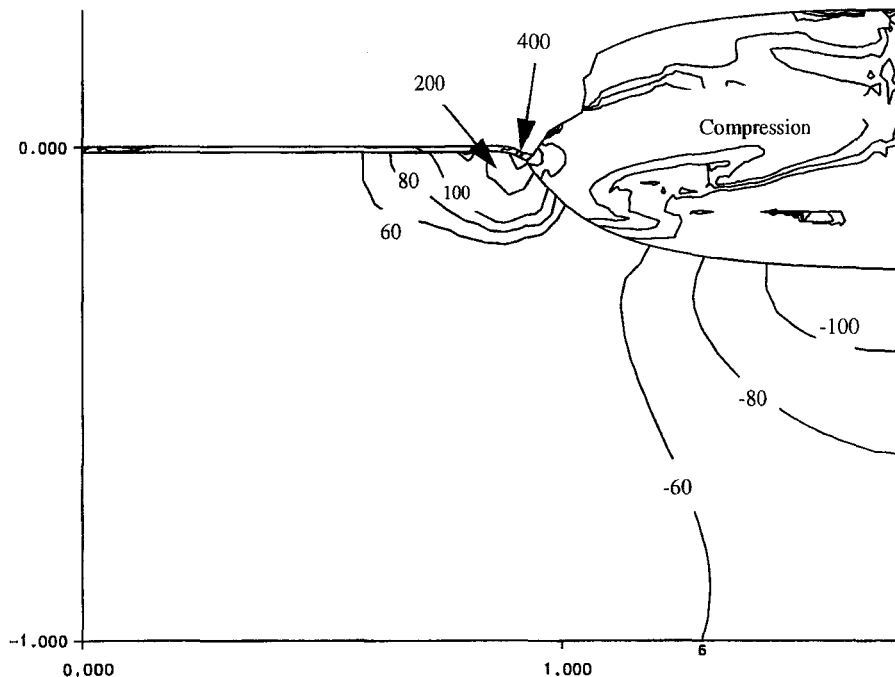


**Figure VI-34:** Résultat de la simulation après la gravure de l'oxyde sacrificiel de 150A. Les isovaleurs correspondent à la pression hydrostatique (en MPa).

En conclusion, si le procédé le permet, il semble en termes de contraintes résiduelles intéressant de supprimer la première réoxydation et déoxydation. En effet, à situation de contrainte donnée, la séquence d'oxydation de 150A suivi de sa gravure n'induit pas d'augmentation des niveaux de contraintes, ce qui n'est pas le cas de la première réoxydation (400 A). Or il est important de diminuer toutes les sources de contraintes dans le procédé. En effet, le procédé PBL est réputé induire d'importantes contraintes mécaniques, ainsi que nous avons pu l'observer. Ces contraintes peuvent avoir pour conséquence de perturber l'oxydation de grille qui suit la formation de la structure d'isolation. Une réduction de la cinétique d'oxydation due à des niveaux de contraintes élevées aura pour effet une diminution de l'épaisseur de la grille, ce qui pour le fonctionnement du circuit peut s'avérer extrêmement problématique.

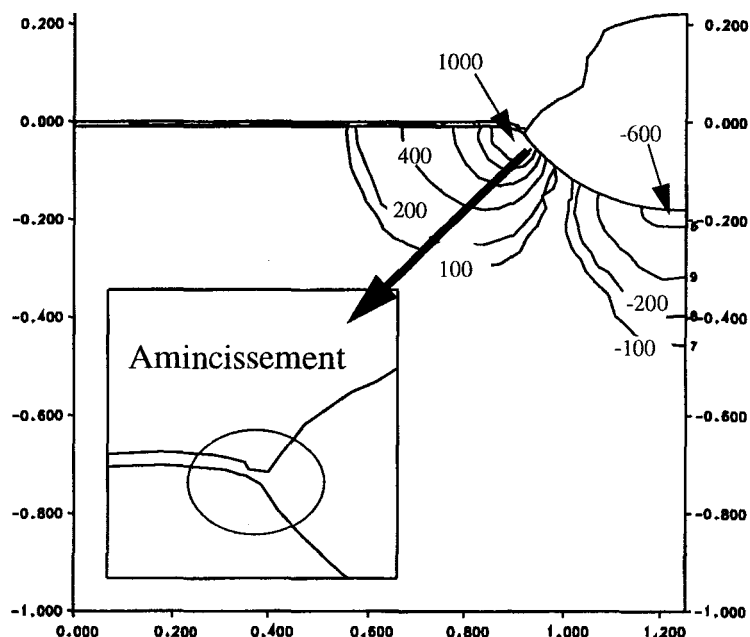
### VI.2.5- Formation de la Grille

Etant donné que l'approche n'utilisant qu'une seule oxydation sacrificielle de 150 Angstroms s'est révélée plus favorable, nous avons simulé l'étape d'oxydation de l'oxyde de grille, en ne considérant que cette option, et ce pour différents dimensionnels. La figure VI-35 donne la distribution de la pression hydrostatique dans la structure large, correspondant à une ouverture du masque d'isolation de 1  $\mu\text{m}$ . On observe peut d'évolution des contraintes, notamment du pic compressif dans la région du bec d'oiseau.



**Figure VI-35:** Pression hydrostatique en MPa dans la structure en fin d'oxydation de grille. Le procédé simulé correspond au procédé n'incluant qu'une seule oxydation sacrificielle préliminaire.

Cependant lorsqu'on diminue l'ouverture du masque d'isolation, on note clairement une nette augmentation des contraintes notamment dans la zone du bec d'oiseau, comme on peut le voir sur la figure VI-36. Des niveaux extrêmement élevés de 1000MPa sont calculés, qui, très surement surestimés, témoignent clairement des problèmes potentiels.



**Figure VI-36:** Pression hydrostatique en MPa dans la structure en fin d'oxydation de grille pour une ouverture du masque d'isolation de  $0.5 \mu\text{m}$ . Le procédé simulé correspond au procédé n'incluant qu'une seule oxydation sacrificielle préliminaire. L'insert montre un agrandissement de la zone du bec d'oiseau, mettant en évidence un amincissement de l'oxyde de grille.

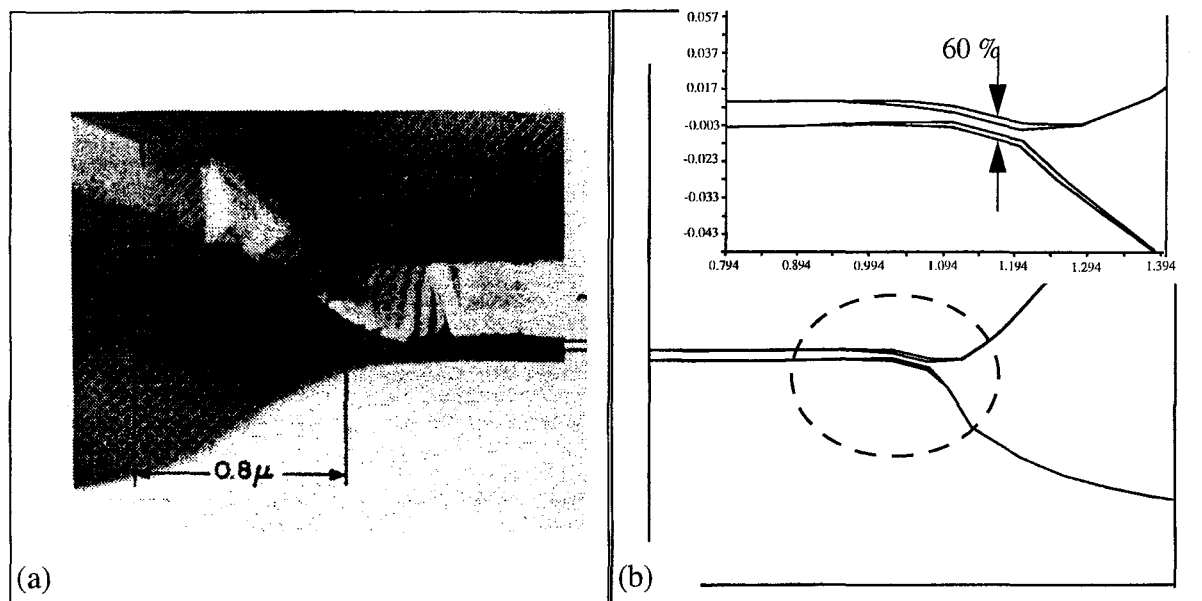
De plus, si on se focalise sur le voisinage du bec d'oiseau, on observe une réduction de l'épaisseur de l'oxyde formé à cet endroit, comme cela est mis en évidence sur la figure VI-36. Ce phénomène traduisant une réduction locale de la vitesse d'oxydation à cet endroit est due à la présence de contraintes compressives normales à la surface du silicium qui augmentent l'énergie d'activation de la réaction [10].

Ce phénomène d'amincissement local de l'oxyde de grille a également été observé par Shankoff [13] sur des structures LOCOS, et interprété comme une réduction de la cinétique d'oxydation lors de la formation de l'oxyde de grille, due aux contraintes mécaniques présentes dans la structure. La prise en compte de ces contraintes créées par ces étapes du procédé nous a permis de reproduire parfaitement le phénomène et d'obtenir un amincissement local de l'oxyde de grille d'environ 60%, en parfait accord avec les mesures TEM réalisées.

La figure VI-37 montre une coupe de la structure LOCOS, mettant en évidence la réduction de l'oxyde de grille [13], comparée aux résultats de simulation obtenus après formation de l'oxyde de grille de 125Å, en prenant en compte le comportement élastoplastique du silicium.

En conclusion, la simulation de ce procédé CMOS 0.35 micron nous a permis de suivre l'évolution des contraintes mécaniques au cours des différentes étapes du procédé: formation de l'empilement du PBL, oxydation PBL, oxydations sacrificielles et finalement oxydation de grille. Ce travail a permis de suggérer l'élimination de la première oxydation sacrificielle, aux vues des contraintes qu'elles engendrent dans la structure. Si les autres aspects du procédé le permettent, cette élimination contribue à ne pas augmenter, aux cours des étapes

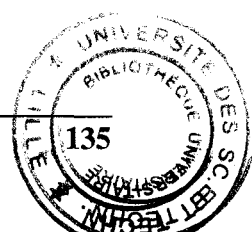
de "cleaning" entre la formation du PBL et l'oxydation de grille, les contraintes résiduelles issues de l'oxydation de champ. Nous avons également montré que le procédé est susceptible, pour les dimensionnels les plus petits, d'engendrer un amincissement de l'oxyde de grille, localement autour du bec d'oiseau, de part les niveaux de contraintes compressives présents à cet endroit. Cet amincissement peut s'avérer critique pour le fonctionnement du dispositif. Il est corrélé à une réduction de la cinétique d'oxydation due à l'état compressif du silicium. Dans le cas de notre étude, l'amincissement commence à être observé sur des structure ayant une ouverture du masque d'isolation de  $0.5\mu\text{m}$ .



**Figure VI-37:** (a) Coupe SEM de la structure LOCOS montrant un amincissement de l'oxyde de grille [13]. (b) Résultat de simulation de l'oxydation de grille dans cette même structure, reproduisant le phénomène de réduction de l'épaisseur de la grille.

## Références Bibliographiques du Chapitre 6

- [1] P. Ferreira, V. Senez and B. Baccus, "Mechanical Stress Analysis of an LDD MOSFET Structure", IEEE TED, vol. 43, n. 9, pp. 1525-1532, September 1996.
- [2] V. Senez, D. Collard, P. Ferreira and B. Baccus, "Simulation of Advanced Field Isolation using Calibrated Viscoelastic Stress Analysis", Proceedings of IEDM 94, pp. 881-884, December 1994.
- [3] H Miura, N Saito, N Okamoto, "Mechanical Stress Simulation During Gate Formation of MOS Devices Concerning Crystallization Induced Stress of P-doped Silicon Thin Films", Proceedings of SISDEP 1993, pp. 177-180, 1993.
- [4] S. Onishi, A. Azakuwa, K. Tanaka and S. Sakiyama, "A Mechanism of the Sidewall Process Induced Junction Leakage Current of LDD Structures", J. Electrochemical Soc., vol. 138, n. 5, p. 1439, 1991.
- [5] B.H. Rabin, R.L. Williamson, S. Suresh, "Fundamentals of Residual Stress in Joints between Dissimilar Materials", MRS Bulletin, p. 37, January 1995.
- [6] W. Kern and R. K. Smeltzer, "Boronphosphosilicate Glasses for Integrated Circuits", Solid State Technology, n. 28, p. 171, 1985.
- [7] S.M. Sze, "VLSI Technology", Mc Graw Hill, 2nd Edition, pp 253-260, 1988.
- [8] P. Ferreira, V. Senez, B. Baccus, J. Varon and J. Lebailly, "Finite Element Optimization of a MOSFET Structure : The Role of Interlayer Material for Residual Stress Reduction", Proceedings of IEDM 95, pp. 503-506, Washington, December 1995.
- [9] P. Ferreira and V. Senez, "Enhancement of Oxidation Modeling with Stress Calculations within IMPACT-4", Contract R396 for ST Microelectronics, Crolles, September 1996.
- [10] V. Senez, "Modélisation Bidimensionnelle de l'oxydation du silicium: Analyse viscoélastique de la relaxation des contraintes", Thèse présentée à l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres-Artois, no. d'ordre 1449, Janvier 1995.
- [11] M. Kawata and T. Katoda, "Characterization of Stress Generated in Polycrystalline Silicon during Thermal Oxidation by Laser Raman Spectroscopy", J. Appl. Phys., vol. 75, n. 11, June 1994.
- [12] J. Nagel, M. Reiche, S. Hopfe and D. Katzer, "Stress-Induced Void Formation in Interlevel Polysilicon Films during Polybuffered Local Oxidation of Silicon", J. Electrochem. Soc. vol. 140, n. 8, pp. 2356-2359, 1993.
- [13] T.A. Shankoff, T.T. Sheng, S.E. Hazko, R.B. Marcus and T.E. Smith, "Bird's Beak Configuration and Elimination of Gate Oxide Thinning Produced during Selective Oxidation", J. Electrochem. Soc. vol. 127, n. 1, pp. 216-222, 1980.
- [14] T. Uchida, N. Kotani, K. Kobayashi, Y. Mashiko, and N. Tsubouchi, "A Simulation of Plastic Deformation of Silicon During Thermal Oxidation", Proceedings of IEDM 93, pp. 315-318, Washington DC, December 1993.





# Chapitre 7

---

## VII- Conclusions

La miniaturisation des dispositifs micro-électroniques reste encore de nos jours le meilleur moyen d'améliorer les performances des circuits intégrés. L'utilisation de nouveaux matériaux aux propriétés spécifiques tels que le cuivre pour les métallisations, les films à faible constantes diélectriques (low k) comme inter-métal, en fin de procédé, ou au contraire les matériaux à haute constante diélectrique pour former la capacité MOS sont de nouvelles approches permettant d'augmenter encore les performance des dispositifs.

Dans ces perspectives, les contraintes mécaniques créées dans les couches minces doivent être parfaitement identifiées et maîtrisées pour limiter les défaillances des composants. Les défauts engendrés par les contraintes mécaniques apparaissent lorsqu'elles sont supérieures à la résistance mécanique des couches. L'état de contrainte résiduelle de la couche est composé de plusieurs composantes élémentaires, qu'il est indispensable d'extraire afin de pouvoir cibler l'optimisation du procédé.

Industriellement, la méthode la plus utilisée permettant de déterminer les contraintes dans un film est basée sur la mesure de la courbure de tranche. Cette méthode permet de mesurer par déviation laser la déformation macroscopique de la couche. Elle présente l'avantage de pouvoir être appliquée à la fois aux couches polycristallines et amorphes. Elle est de plus facile à mettre en oeuvre.

Cependant, elle ne donne accès qu'à la contrainte moyenne globale dans le film. Elle ne permet pas de mesurer localement la contrainte ni de remonter à l'origine de ces contraintes.

Le modèle de calcul des contraintes mécaniques que nous avons développé permet de répondre à cette attente. Il apporte une information locale de la contrainte, prend en compte les différentes sources de contraintes et permet ainsi l'évaluation séparée de l'influence de chacune de ces sources, et permet de rapidement répondre à un problème d'optimisation de procédé lié à l'état de contrainte.

Sur la base existante de modélisation de l'oxydation du silicium, nous avons développé une approche permettant le calcul complet des contraintes mécaniques ainsi que des déformations dans l'ensemble des matériaux, en résolvant les équations d'équilibre de la structure. Plusieurs comportements mécaniques sont envisagés: un comportement de base purement élastique, un comportement viscoélastique linéaire, un comportement beaucoup plus complexe

viscoélastique non linéaire, pour lequel la viscosité est prise dépendante de l'état de contrainte dans le matériau et enfin un comportement élastoplastique prenant en compte un seuil de contrainte au delà duquel des déformations irréversibles apparaissent accompagnées d'un niveau de contrainte maximal fixe. La formulation des propriétés rhéologiques des matériaux nous permet d'attribuer un comportement adéquat à chaque matériau en fonction des besoins de modélisation, plus ou moins complexes. Ainsi, par défaut, le silicium est considéré comme purement élastique, ce qui minimise les temps de calcul et répond à la plupart des besoins de simulation. En cas de nécessité, il est possible et facile de lui attribuer un comportement élastoplastique nettement plus complexe. La base de donnée de départ considère le polysilicium également élastique, l'oxyde et le nitrure de silicium viscoélastiques non linéaires. Le polysilicium peut être au besoin traité comme viscoélastique linéaire.

L'algorithme de prédiction des contraintes prend en compte la quasi totalité des différentes sources: les contraintes thermiques issues des différences des coefficients de dilatation thermiques des matériaux, les contraintes intrinsèques qui apparaissent lors des dépôts des matériaux et dépendent des techniques de dépôt, les contraintes issues des discontinuités lors des gravures, les contraintes dues aux oxydations non planes.

La calibration des différents paramètres rhéologiques des matériaux a été réalisée pour l'ensemble des températures mises en oeuvre, allant de la température ambiante à la température du procédé. Cette calibration propre à des données expérimentales issues de nos partenaires industriels n'est pas utilisable pour tous les procédés. Cependant, nous proposons dans ce manuscrit une méthode originale permettant d'obtenir les caractéristiques rhéologiques nécessaires à la modélisation d'un procédé particulier. S'il est illusoire de vouloir calibrer un modèle physique phénoménologique de manière définitive, il est nécessaire de disposer de méthodes permettant de le faire pour chaque cas particulier.

La simulation est réalisée par la méthode des éléments finis qui discrétise les équations non linéaires d'équilibre des forces. L'assemblage éléments finis est basé sur la technique des résidus pondérés et la méthode de Galerkin. Une méthode de Gauss directe résout les systèmes linéaires résultant de la discrétisation de l'équation d'équilibre. Les non linéarités de cette équation sont traitées par une procédure de sous relaxation dynamique des contraintes. Enfin, un remaillage systématique de la structure est effectué, ce qui préserve une bonne qualité du maillage et l'exactitude des calculs.

Cette modélisation a été appliquée à l'étude extensive des contraintes dans les procédés BICMOS 0.8 micron de Philips Caen et CMOS 0.35 micron de ST-Microelectronics. Les bons accords obtenus entre la simulation et les résultats expérimentaux permettent de valider l'ensemble des algorithmes et modèles développés. Dans chaque cas, des propositions de changement ont permis une optimisation des procédés en termes mécaniques: forme à flanc progressifs sur les espaceurs, utilisation d'une bicouche d'oxyde BPSG dans le procédé BICMOS, suppression d'une étape de réoxydation dans le procédé CMOS.

Ce travail constitue une première étape dans l'étude généralisée des contraintes mécaniques dans les structures micro-électroniques. Il nécessite d'être étendu en introduisant les contributions extrinsèques des contraintes, mises en oeuvre par exemple lors d'étapes de fluage, de densification. Il nécessite également d'être poursuivi par une calibration d'autres matériaux tels que les métaux (Al, AlCu, Ti, Co, Ta, Cu.) ou autres diélectriques (SOG, oxydes PECVD.).

Cette première étape permet désormais d'envisager l'étude d'un modèle de géné-

ration et d'évolution des dislocations dans le substrat de silicium. En intégrant les travaux déjà réalisés sur la diffusion des dopants et l'oxydation du silicium, l'étude généralisée des contraintes ouvre la porte à une formulation généralisée de la cinétique d'évolution des dislocations. Par la suite, une passerelle entre ces résultats de procédé et la modélisation de dispositifs devra être également envisagée. En effet, si la détermination des niveaux de contraintes dans une structure, les risques de formation ou d'extension de dislocations dans le substrat sont des résultats de plus en plus critiques pour les technologues, la mise au point de procédés devra passer par l'analyse des effets de ces contraintes ou dislocations sur les performances des dispositifs. Il est connu que les contraintes agissent directement sur les caractéristiques électriques des transistors, en modifiant par exemple la mobilité électronique.

En parallèle, deux autres axes de recherche en pleine évolution pourront également s'appuyer sur les développements effectués au cours de ces travaux: il s'agit de la simulation 3D de technologie silicium d'une part et des micro-technologies qui se basent toutes deux très largement sur les acquis en technologie des circuits intégrés.