

x50376
2000
390

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

THOMAS HOFFMANN

Ingénieur de l'Institut Supérieur d'Electronique du Nord

MODÉLISATION ET SIMULATION MULTIDIMENSIONNELLE DES CONTRAINTES MÉCANIQUES EN TECHNOLOGIES SILICIUM AVANCÉES

Soutenance le 23 Octobre 2000, devant la commission d'examen :

Président	:	M. G. SALMER
Rapporteurs	:	M. B. LEROY M. G. CHARITAT
Directeur de la recherche	:	M. D. COLLARD
Co-responsable de thèse	:	M. V. SENEZ
Examineurs	:	MME. I. DEWOLF M. F. MURRAY M. H. JAOUEN

SCD LILLE 1



D 030 199869 6

50376
2000
390

à mes parents,
à ma famille,
à mes amis.

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).



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

Je tiens à remercier vivement Messieurs B. LEROY et G. CHARITAT qui ont accepté d'être les rapporteurs de ce travail.

Madame I. DEWOLF de l'IMEC m'a fait l'honneur de participer à mon jury de thèse. Je l'en remercie très sincèrement.

Je tiens à remercier également Monsieur H. JAOUEN de ST-Microelectronics qui m'a fait le plaisir d'accepter de faire partie de ce jury. Je lui dois ma formation initiale en simulation TCAD et je lui exprime ma reconnaissance pour l'intérêt qu'il a porté à mes travaux.

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, F. MURRAY et P. LEDUC pour leur contribution à ce travail de thèse.

J'exprime toute ma gratitude à Monsieur M. LANNOO, directeur du laboratoire de l'ISEN, et Messieurs A. KAISER et E. DUBOIS, responsables successifs 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.

Je tiens tout spécialement à remercier Monsieur V. SENEZ, qui m'a largement conseillé et aidé tout au long de ce travail. 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!

J'exprime ma profonde reconnaissance à Monsieur D. COLLARD pour avoir assuré la direction universitaire de cette thèse.

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 du Ministère de l'Education Nationale, de la Recherche et de la Technologie.

SOMMAIRE

Chapitre I. INTRODUCTION	5
I.1. Contexte de la thèse	5
I.2. Objectifs de la thèse	6
I.3. Plan du manuscrit	8
Chapitre II. MÉCANIQUE DES MATÉRIAUX ET CALCUL DE STRUCTURES	10
II.1. Mécanique des milieux continus	10
II.1.1. Le Tenseur Contrainte	10
II.1.2. Le Tenseur Déformation	13
II.1.3. Formulation du Principe Fondamental d'Equilibre	15
II.2. Principes de la Rhéologie	17
II.2.1. Lois de comportement élémentaires	18
II.2.2. Lois de comportement complexes	23
II.2.3. Bilan: classification des lois de comportements	30
II.3. Mise en œuvre de la méthode des éléments finis	31
II.3.1. Principes de base	31
II.3.2. Les conditions aux limites	33
II.3.3. Le maillage	35

II.4. Hypothèses pour les études bidimensionnelles	37
II.4.1. Déformations planes	37
II.4.2. Contraintes planes	38
Chapitre III. SOURCES DE CONTRAINTES ET TECHNIQUES DE MESURE	43
<hr/>	
III.1. Origines des contraintes mécaniques en microélectronique	43
III.1.1. Contraintes thermiques	44
III.1.2. Contraintes intrinsèques	46
III.1.3. Contraintes extrinsèques	48
III.1.4. Contraintes liées aux dopages	48
III.1.5. Contraintes topographiques	48
III.2. Techniques de mesure des contraintes et des propriétés mécaniques	50
III.2.1. Synthèse des techniques d'extraction des propriétés mécaniques	51
III.2.2. Synthèse des techniques actuelles de mesure de contraintes	52
III.3. Spectroscopie micro-Raman	56
III.3.1. Technique expérimentale	56
III.3.2. Théorie	57
III.3.3. Méthode de simulation de la spectroscopie micro-Raman	59
III.3.4. Exemples	63
Chapitre IV. MODÉLISATION NUMÉRIQUE	71
<hr/>	
IV.1. Modélisation analytique	71
IV.1.1. Présentation de trois modèles analytiques	72
IV.1.2. Comparaison des modèles analytiques et numériques	74
IV.2. Implantation numérique des comportements rhéologiques	76
IV.2.1. Calcul mécanique général	76
IV.2.2. Problèmes à loi de comportement non linéaire	78
IV.3. Modélisation des sources de contraintes mécaniques	86
IV.3.1. Modèles existants	87
IV.3.2. Phénomènes extrinsèques	90
IV.3.3. Effet des niveaux élevés de dopage	94
IV.3.4. Modélisation de la croissance des matériaux	96

Chapitre V. CALIBRATION ET VALIDATION	113
<hr/>	
V.1. Densification des oxydes déposés	113
V.1.1. Calibration des phénomènes d'absorption/évaporation d'eau	113
V.1.2. Calibration de la densification	117
V.2. Cristallisation du silicium amorphe	122
V.3. Oxydation du silicium	125
V.3.1. Oxydation plane	125
V.3.2. Mise en évidence d'effets 3D	127
V.3.3. Calibration des contraintes des structures d'isolation	129
V.4. Siliciures	134
V.4.1. Cinétique du $TiSi_2$	134
V.4.2. Validation des contraintes	136
V.5. Influence des forts dopages	137
V.5.1. Contraintes d'épitaxie	137
V.5.2. Déflexion de poutres de silicium	140
V.6. Phénomènes de plasticité	144
V.6.1. Alliages d'Aluminium et de Cuivre	144
V.6.2. Comportements plastiques du silicium	151
Chapitre VI. APPLICATIONS	159
<hr/>	
VI.1. Caractérisation des films minces des procédés étudiés	159
VI.2. Analyse des contraintes dans le procédé SUBILO	160
VI.2.1. Position du problème	160
VI.2.2. Description du procédé technologique	162
VI.2.3. Mécanismes physiques responsables des cloques	163
VI.2.4. Optimisation du dépôt du film de TiW	167
VI.3. Analyse des craquements de film pour un procédé BiCMOS	171
VI.3.1. Position du problème	171
VI.3.2. Description du procédé technologique	172
VI.3.3. Résultats de simulation	173
VI.3.4. Optimisation de la densification du SOG	174

Chapitre VII. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES **181**

Annexe **185****Liste des figures** **193****Liste des tableaux** **200**

Chapitre I : INTRODUCTION

L'élaboration et le développement de nouvelles technologies pour les circuits intégrés silicium ne se fait pas seulement avec les équipements de fabrication les plus sophistiqués, mais aussi avec l'aide des outils de simulation de procédés et de comportement électrique. La simulation permet une diminution des coûts d'optimisation d'une technologie. Grâce à l'utilisation de plans d'expériences, elle permet de mieux cibler les dégroupages expérimentaux et ainsi d'en diminuer le nombre.

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 des dispositifs intégrés entre dans ce cadre et est devenue en quelques années aussi importante que la prédiction des topographies et profils de dopage.

1.1 Contexte de la thèse

Depuis les années 60, la microélectronique silicium a progressé de façon spectaculaire. La vitesse de fonctionnement des circuits ne cesse de croître alors que les dimensions des dispositifs élémentaires diminuent. 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 d'environ 33% tous les trois ans en accord avec la loi prédite par G.E. Moore [1]. L'une des tendances témoignant de l'accroissement de complexité est le recours à de nombreux 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 élémentaire (*front-end*) et 6 pour les connexions (*back-end*) [2]. Cette augmentation est liée aux progrès des technologies d'interconnexions des composants (structure double Damascene, Chemical Mechanical Polishing (CMP),...), qui permettent d'empiler couramment 4 voire 5 niveaux de métallisation [3]. Ces progrès sont en grande partie rendus possibles par l'utilisation de nouveaux matériaux tels que les siliciures (TiSi_2 , CoSi_2 ,...), le tungstène ou autres composés

métalliques, tout en améliorant les étapes de planarisation par pelliculage de SOG (Spin-On-Glass) 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. La juxtaposition de matériaux aux propriétés mécaniques parfois très différentes peut affecter la stabilité mécanique des empilements d'interconnexions. Or la défaillance d'une seule de ces connexions remet en cause le fonctionnement de tout le circuit intégré. C'est pourquoi, outre ses propriétés électriques, le multicouche doit présenter une grande fiabilité face aux diverses sollicitations mécaniques et thermiques auxquelles il est soumis tant lors des étapes de fabrication que lors du fonctionnement du circuit.

En amont, les problèmes de fiabilité liés à l'existence de contraintes mécaniques élevées peuvent également survenir au cours des nombreuses étapes de réalisation des composants, et se manifestent généralement par l'apparition de défauts (ex: dislocations). Ces défauts donnent généralement lieu ensuite à des dysfonctionnements électriques (ex: courants de fuite, courts-circuits ou circuits ouverts,...). Les facteurs à l'origine de ces défaillances sont multiples. Ainsi, les films minces ne sont pas nécessairement déposés dans des conditions énergétiques optimales et des contraintes qualifiées "d'intrinsèques" peuvent en résulter. 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.

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 mécanique des matériaux utilisés, et d'analyser les interactions entre matériaux au niveau des interfaces.

1.2 Objectifs de la thèse

Le travail réalisé au cours de cette thèse a consisté dans un premier temps à analyser et comprendre les phénomènes générateurs de contraintes mécaniques afin de les modéliser. Les algorithmes permettant ces calculs ont été établis et inclus dans des simulateurs bi- et tri-dimensionnels de procédés technologiques développés dans le groupe de simulation TCAD (*Technology Computer Aided Design*) de l'ISEN.

La figure I.1 décrit de manière schématique l'environnement de simulation TCAD installé à l'ISEN. Au centre de cet environnement, il y a le simulateur bidimensionnel IMPACT qui permet de simuler la fabrication de circuits intégrés (IMPACT-4 [4]) par une méthode basée sur les éléments finis et leur comportement électrique (IMPACT-3 [5]) par une méthode de différence finie. IMPACT est interfacé aux outils commerciaux des sociétés ISE-AG et Silvaco qui sont également présent dans l'environnement. Cet interfaçage permet d'utiliser pour chaque problème les points forts de chaque logiciel. Il permet également d'avoir accès à des outils de visualisation très performants (TONYPLOT et PICASSO). Cet environnement inclut également des outils de simulation 3D. Il s'agit de DESSIS (ISE-AG) pour la partie simulation de comportement électrique. En ce qui concerne la simulation de procédés, on utilise le module

DIFOX [6], que nous avons développé dans le cadre des projets européens ESPRIT 8150 PROMPT¹ puis ESPRIT 24038 PROMPT II, et qui permet de simuler les étapes de recuits thermiques en ambiance humide et oxydante. On utilise le générateur de structures 3D PROSIT (ISE-AG) pour créer la géométrie initiale et le mailleur MESH (ISE-AG) pour discrétiser cette structure initiale. Cet environnement est utilisé actuellement dans nos études notamment pour la communauté européenne (projet IST STREAM²) et pour PHILIPS (projet STSI³).

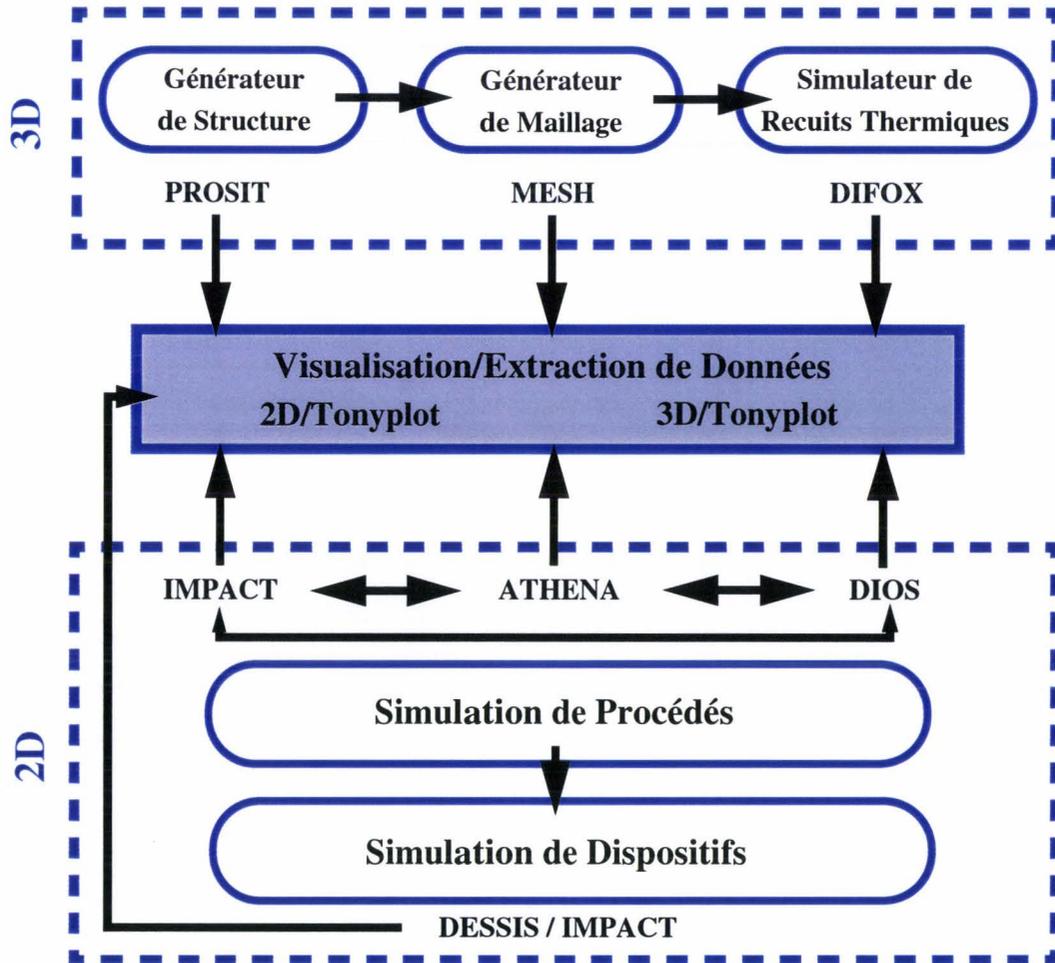


Figure I.1: Vue schématique de l'environnement de simulation mis en place dans l'équipe TCAD de l'ISEN pour la conception de circuits sur silicium.

Il convient de dresser un bilan des fonctionnalités, en terme de calcul de contraintes mécaniques, des outils IMPACT-4 et DIFOX au commencement de ce travail.

Le cœur du calcul mécanique général, ainsi que certaines sources de contraintes (thermique, intrinsèque et d'oxydation), ont déjà été implémentés dans le IMPACT-4 [7,8]. Néanmoins, nous verrons que certaines améliorations peuvent être apportées et de nombreuses sources restent encore non modélisées. Tous les développements de nouveaux modèles sont d'abord effectués en 2D puis étendus, le cas échéant, en 3D.

1. **PR**ocess **O**ptimization in **M**ulti**P**le Dimensions for Semiconductor Technology.
2. **STRE**ss minimisation and **A**pplication to **M**emories.
3. Service des Technologies et de la Société de l'Information.

En ce qui concerne la modélisation 3D, l'objectif est d'étudier les champs de contraintes générées par l'oxydation du silicium, en tenant compte d'une croissance tridimensionnelle de l'oxyde. Pour atteindre cet objectif, il est nécessaire d'étendre à la troisième dimension les algorithmes de calcul de cette croissance, déjà existants en 2D [8]. Une attention toute particulière doit par ailleurs être portée à l'adaptation de ces algorithmes en 3D afin de limiter l'accroissement du temps de calcul qui l'accompagne généralement [9].

1.3 Plan du manuscrit

Le contexte et les objectifs de ce travail rapidement brossés, la modélisation des contraintes mécaniques apparaît clairement comme essentielle pour l'optimisation des nouvelles technologies. Les chapitres suivants détaillent les résultats obtenus dans le cadre de cette thèse.

Le second chapitre s'attache à présenter les bases de mécanique des matériaux destinées à faciliter la compréhension du reste du manuscrit. La théorie de la rhéologie et des différentes lois de comportement qui en sont le fondement y sont tout particulièrement détaillées. Le traitement numérique d'analyse structurale, basée sur la méthode des éléments finis, est également présenté dans ce chapitre.

Le troisième chapitre inventorie dans un premier temps les principales sources de contraintes mécaniques rencontrées dans les technologies silicium, puis présente les différentes techniques de mesures de contraintes dans les dispositifs, ainsi que les outils de caractérisation des propriétés mécaniques des matériaux.

Le quatrième chapitre est consacré à la description détaillée des modèles de calcul de contraintes développés lors de ce travail. Les modèles utilisés sont volontairement simples, de manière à réduire le nombre de paramètres et ainsi faciliter la compréhension des mécanismes physiques mises en œuvre.

Le chapitre cinq présente les résultats de validation et de calibration des modèles établis en vue de garantir aux utilisateurs une prédiction la plus précise possible des niveaux de contraintes mécaniques. Pour ce faire, les résultats de simulation sont systématiquement confrontés aux mesures obtenues par des techniques de mesure globale (déflexion de plaque) ou locale (spectroscopie micro-Raman).

Le chapitre six consiste en une présentation d'applications de ces modèles. Deux études réalisées dans le cadre d'un partenariat industriel avec Philips Semiconducteurs à Caen y sont détaillées. La première concerne l'analyse d'une défaillance survenue récemment sur une technologie bipolaire. La seconde est relative à l'évaluation des contraintes mécaniques générées lors de la fabrication de la structure d'interconnexions d'une technologie BiCMOS.

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

Références Bibliographiques du Chapitre I

- [1] **G.E. MOORE**, IEEE Spectrum, **16**(4), p. 30, 1979.
- [2] **J. LEBAILLY**, Communications privées, Philips Semiconducteurs, Centre de Caen.
- [3] **P. FELIX**, *Interconnects for ULSI: State of the Art and Future Trends*, Proceedings of ES-SDERC'95, pp. 5-14, 1995.
- [4] **B. BACCUS, D. COLLARD, P. FERREIRA, T. HOFFMANN, E. LAMPIN, V. SENEZ et E. VANDENBOSSCHE**, *IMPACT 4.9: User's guide*, 1998.
- [5] **E. DUBOIS, B. BACCUS, D. COLLARD et D. MOREL**, *IMPACT 3: User's guide*, 1991.
- [6] **B. BACCUS, R. BOSSUT, S. BOZEK, J. HERBAUX, T. HOFFMANN, V. SENEZ**, *DIFOX v.2.4: User's Guide*, 1999.
- [7] **P. FERREIRA**, *Introduction du Calcul Mécanique Généralisé dans la Simulation Bidimensionnelle de Procédés Technologiques Silicium*, Thèse de doctorat, USTL, 1999.
- [8] **V. SENEZ**, *Modélisation Bidimensionnelle de l'Oxydation du Silicium: Analyse Viscoélastique de la Relaxation des Contraintes*, Thèse de doctorat, USTL, 1995.
- [9] **H. RUEDA, S. CEA et M. LAW**, *Mechanical Stress Modeling for Silicon Fabrication Processes*, Proc. of SISPAD, 1997.

Chapitre II : MÉCANIQUE DES MATÉRIAUX ET CALCUL DE STRUCTURES

Dans ce chapitre, on dérive le principe fondamental de l'équilibre. Un rappel sur la théorie et les notations de la mécanique des milieux continus est présenté, puis les définitions des grandeurs de base de cette théorie, à savoir les tenseurs de contrainte et de déformation, sont introduits.

L'étude des contraintes et déformations nécessite de caractériser le comportement des matériaux soumis à des charges. C'est le rôle de la Rhéologie. Cette approche nous permettra de modéliser les principales lois de comportement rencontrées pour les matériaux de la microélectronique, en partant des lois élémentaires (élasticité, viscosité, plasticité) pour aboutir aux comportements plus complexes comme l'élastoplasticité ou la viscoélasticité.

Dans une dernière partie, nous présentons les bases de la méthode des éléments finis qui reste l'approche numérique la plus utilisée pour les analyses structurales.

II.1 Mécanique des milieux continus

II.1.1 Le Tenseur Contrainte

II.1.1.1 Définition de la Contrainte

Les contraintes se développent dans un corps quand celui-ci est soumis par exemple à des forces extérieures [1]. Ces contraintes sont définies en première approximation comme le rapport de la force extérieure et de la surface sur laquelle elle s'applique. De manière plus rigoureuse, les contraintes sont les densités d'efforts de cohésion qui se développent sur chaque surface interne infinitésimale dans un solide soumis à des sollicitations mécaniques. Pour illustrer ce concept, considérons un corps arbitraire, en équilibre mécanique, continu et homogène, et soumis à des forces extérieures F_1 , F_2 , F_3 , et F_4 (figure II.1). Ces charges extérieures peuvent être ponctuelles (ex: indentation par une pointe), surfaciques (ex: pression externe), ou volumiques (ex: forces électromagnétiques, thermiques, de gravitation). Pour

déterminer l'effort interne en un point P donné, on décompose le corps en deux volumes Γ_1 et Γ_2 , suivant une section S passant par le point P considéré. Suivant le principe de l'action et de la réaction, sous l'effet des forces extérieures qui s'appliquent sur elle, la partie Γ_1 exerce une force sur Γ_2 , et réciproquement. La partie Γ_2 est donc en équilibre sous l'action des forces extérieures F_i qui lui sont appliquées et des forces intérieures induites par Γ_1 , réparties de manière continue suivant la section transversale S.

L'effort intérieur moyen $\bar{\sigma}$ par unité de surface est donné par la relation:

$$\bar{\sigma} = \frac{\Delta F}{\Delta S} \quad (\text{II.1})$$

où ΔF représente la somme des forces s'exerçant sur la section élémentaire ΔS . Lorsque cette section ΔS tend vers zéro, cet effort moyen tend vers une limite déterminée, appelée le vecteur contrainte conjugué à la surface ΔS , au point P. Ce vecteur contrainte peut être décomposé en une composante normale σ et une composante tangentielle τ par rapport au plan de section. La composante tangentielle est encore appelée contrainte de cisaillement.

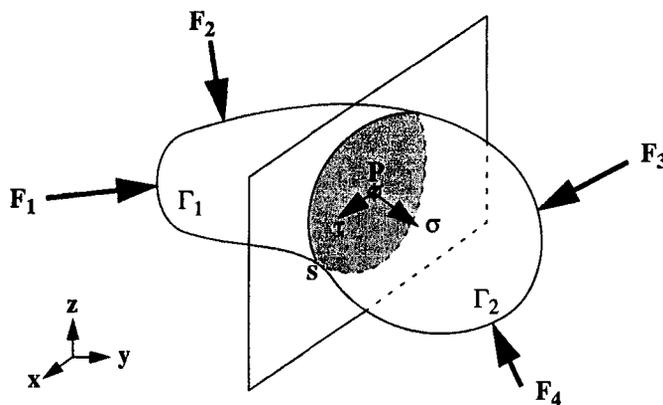


Figure II.1: Corps continue et homogène soumis à des forces extérieures.

Les contraintes normales et tangentielles étant des forces par unité de surface, elles sont exprimées en dynes/cm² ou en Pascal (**10 dynes/cm² = 1 Pa**). Enfin, la contrainte normale est considérée comme positive lorsqu'elle agit en traction (i.e., contrainte en tension), et comme négative lorsqu'elle agit en compression (i.e., contrainte compressive).

II.1.1.2 Expression du Tenseur des Contraintes

Considérons maintenant au point P (figure II.1) un cube élémentaire, dont les côtés sont parallèles aux axes de coordonnées. Les notations employées pour désigner les composantes du tenseur des contraintes, ainsi que les directions adoptées comme positives sont indiquées à la figure II.2. Afin d'homogénéiser les notations, le symbole σ sera utilisé dans la suite du manuscrit pour décrire les composantes du tenseur des contraintes. Néanmoins, une double indexation permet de différencier les contraintes normales et de cisaillement: on postule que la composante σ_{ij} désigne la contrainte agissant sur un plan perpendiculaire à l'axe i et orientée dans la direction j . De ce fait, les contraintes normales correspondent au cas où $i = j$, et les contraintes de cisaillement aux autres cas.

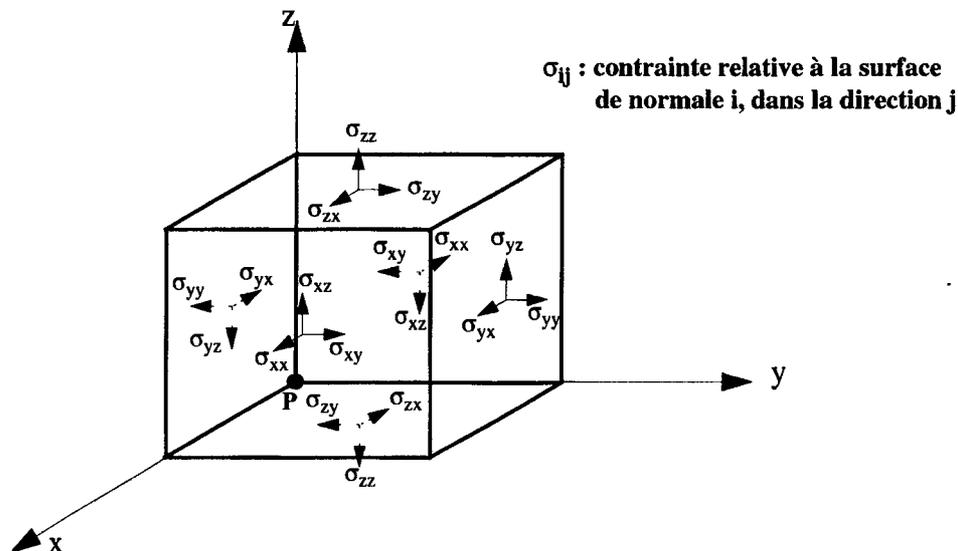


Figure II.2: Définition des composantes du tenseur des contraintes.

Par ailleurs, la simple considération de l'équilibre mécanique de l'élément permet de réduire le nombre des symboles représentant les contraintes de cisaillement. En effet, l'annulation des moments par rapport aux trois axes du repère permet d'écrire les relations suivantes [1]:

$$\sigma_{xy} = \sigma_{yx} , \quad \sigma_{zx} = \sigma_{xz} , \quad \sigma_{yz} = \sigma_{zy} \tag{II.2}$$

Le tenseur de rang 2 des contraintes $[\sigma]$ est donc symétrique et composé de seulement six termes indépendants:

$$[\sigma] = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \tag{II.3}$$

Pour simplifier la manipulation de ce tenseur par la suite, on peut le mettre sous la forme d'un vecteur colonne dont les composantes sont issues du triangle supérieur (grisé) du tenseur:

$$\{\sigma\} = \begin{Bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \end{Bmatrix} \tag{II.4}$$

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

i) la composante sphérique ou de dilatation $[\sigma^v]$:

$$[\sigma^v] = \left(\frac{1}{3}\text{trace}[\sigma]\right) \cdot [I] \tag{II.5}$$

- où [I] représente le tenseur unité;
 ii) la composante de déviation ou déviateur $[\sigma^s]$:

$$[\sigma^s] = [\sigma] - [\sigma^v] \quad (\text{II.6})$$

II.1.2 Le Tenseur Déformation

II.1.2.1 Définition de la Déformation

En réponse à des sollicitations extérieures, les parties élémentaires d'un corps se déplacent les unes par rapport aux autres, ce qui entraîne localement un changement de forme du corps, que l'on appelle déformation. Ainsi, l'application de contraintes à un corps quelconque en équilibre a pour conséquence de déformer et/ou de déplacer ce corps.

L'état de déformation est déterminé à tout instant si l'on peut déterminer le vecteur déplacement $U(u_x, u_y, u_z)$ de chaque point du corps. On distingue, pour chaque élément du tenseur des déformations, une composante volumique (expansion ou contraction sans changement de forme), et une composante angulaire correspondant à un changement de forme à volume constant.

Dans la plupart des cas pratiques, les déplacements élémentaires des particules d'un corps ayant subi une déformation sont infiniment petits et varient d'une manière continue dans le volume du corps (hypothèse d'homogénéité). Deux conséquences importantes en découlent:

- i) le tenseur des déformations peut être linéarisé par rapport à ces déplacements, et,
- ii) la configuration géométrique initiale du corps, Ω_0 , peut être utilisée pour résoudre les lois de comportement des matériaux [2,3]. Le problème qui en résulte est dit "géométriquement linéaire".

Pour certains problèmes, au contraire, les déplacements sont grands par rapport aux dimensions initiales du corps: c'est le cas par exemple lors de la croissance d'oxyde d'isolation épais où la conversion du silicium en dioxyde de silicium (SiO_2) s'accompagne d'un changement de volume de 126%. La relation déplacement-déformation n'est plus linéaire et, de plus, les équations régissant les lois de comportement doivent être résolues pour la configuration courante Ω_t , et non plus pour Ω_0 . Comme les déplacements qui transforment la configuration Ω_0 en Ω_t sont précisément les inconnues du problème, le système à résoudre devient "géométriquement non-linéaire". Ce type de problème sera analysé au chapitre IV, et nous nous limiterons pour l'instant au problème à géométrie linéaire.

II.1.2.2 Expression du Tenseur des Déformations

Pour simplifier l'extraction de la relation déplacement-déformation, nous considérons un système dont les déplacements restent dans un même plan (Pxy), comme illustré à la figure II.3. Soit P un point du corps se déformant dont le déplacement est donné par le vecteur $U(u_x, u_y)$. On affecte les indices '0' et 't' pour désigner la configuration avant et après déformation, respectivement. Le déplacement dans la direction des x d'un point voisin A situé sur l'axe des x à la distance dx du point P sera:

$$u_x + \frac{\partial u_x}{\partial x} dx \quad (\text{II.7})$$

où $\frac{\partial u_x}{\partial x} dx$ représente l'accroissement de longueur selon x du segment initial P_0A_0 . De manière identique, on obtiendra le déplacement d'un point B situé sur l'axe des y à la distance dy du point P:

$$u_y + \frac{\partial u_y}{\partial y} dy \quad (\text{II.8})$$

La déformation de longueur de l'élément, exprimée dans une direction particulière, correspond à l'allongement par unité de longueur de l'élément. On déduit donc, à partir des équations (II.7) et (II.8), deux déformations ϵ_{xx} et ϵ_{yy} , selon x et y respectivement:

$$\epsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad \epsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y} \quad (\text{II.9})$$

Considérons maintenant la modification subie par l'angle que font entre eux les segments P_0A_0 et P_0B_0 . Le segment P_tA_t fait avec la direction initiale P_0A_0 un angle infiniment petit: $\frac{\partial u_y}{\partial x}$. De même, le segment P_tB_t fait avec la direction P_0B_0 un angle infiniment petit: $\frac{\partial u_x}{\partial y}$. Ainsi, l'angle $A_0P_0B_0$, qui au départ était droit, a subi une variation de: $\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y}$. Ce terme correspond à la somme des déformations de cisaillement $\epsilon_{xy} + \epsilon_{yx}$.

Par ailleurs, l'extension des calculs à la troisième dimension est tout à fait similaire. Comme pour les contraintes, la condition d'équilibre préserve la symétrie du tenseur de déformations, dont les composantes s'écrivent:

$$\epsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad (\text{II.10})$$

$$\epsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad (\text{II.11})$$

$$\epsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z}, \quad (\text{II.12})$$

$$\epsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) = \epsilon_{yx}, \quad (\text{II.13})$$

$$\epsilon_{yz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} \right) = \epsilon_{zy}, \quad (\text{II.14})$$

$$\epsilon_{zx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_z}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial z} \right) = \epsilon_{xz}. \quad (\text{II.15})$$

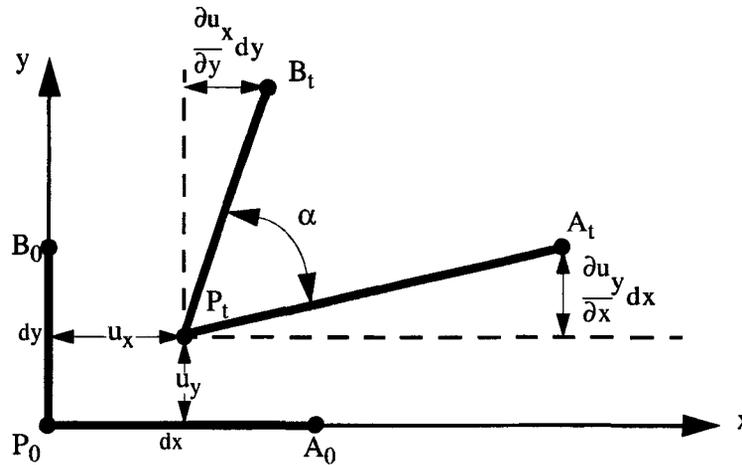


Figure II.3: Définition du champ des déplacements dans le plan (Pxy).

Le tenseur de rang 2 des déformations $[\epsilon]$ est donc composé de six termes indépendants:

$$[\epsilon] = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{xz} & \epsilon_{yz} & \epsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad (II.16)$$

Pour simplifier la manipulation de ce tenseur par la suite, on peut le mettre sous la forme d'un vecteur colonne dont les composantes sont issues du triangle supérieur (grisé) du tenseur:

$$\{\epsilon\} = \begin{Bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{xy} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{xz} \end{Bmatrix} \quad (II.17)$$

Le facteur '2' apparaissant dans ce vecteur provient de l'égalité des déformations de cisaillement (équations (II.13)-(II.15)).

Remarque: comme pour le tenseur des contraintes, le tenseur des déformations est décomposable en une partie sphérique, ϵ^v (changement de volume), et une partie de déviation, ϵ^s (changement de forme).

II.1.3 Formulation du Principe Fondamental d'Equilibre

En vue d'établir les équations constitutives de l'élasticité linéaire, nous partons des lois élémentaires de la mécanique. Pour dériver les équations du principe d'équilibre de manière

générale, nous considérons à nouveau un élément bidimensionnel infinitésimal d'un corps en équilibre, représenté à la figure II.4.

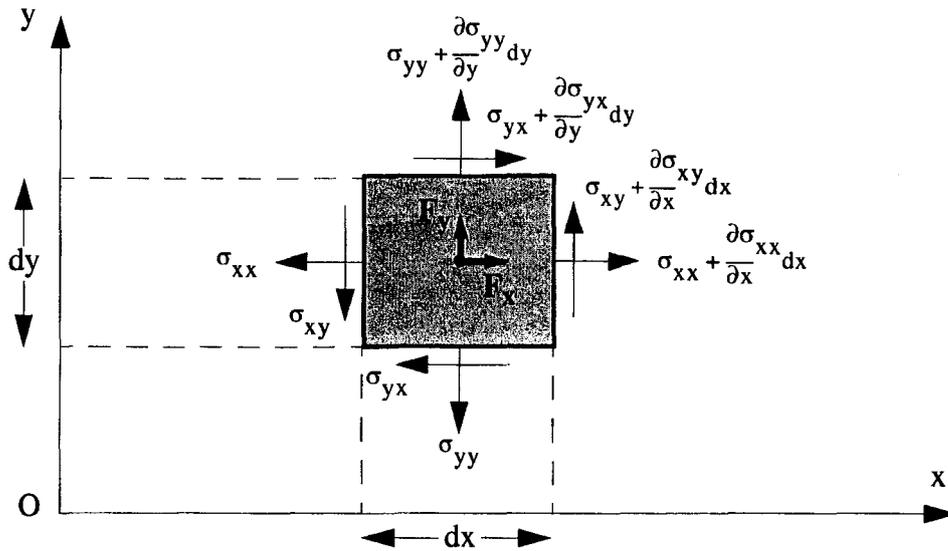


Figure II.4: Bilan des forces internes et externes d'un corps élémentaire en équilibre.

Pour le calcul des forces agissant sur les faces de l'élément, on considère ces faces comme infiniment petites de sorte que chaque force est le produit de la contrainte au centre de l'élément, par l'aire de celui-ci. En désignant par (F_x, F_y) les composantes de la résultante des forces extérieures par unité de volume de l'élément, l'équation d'équilibre obtenue en faisant le bilan des forces agissant sur l'élément sera, respectivement dans les directions x et y :

$$\left(\sigma_{xx} + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} dx\right) dy - \sigma_{xx} dy + \left(\sigma_{yx} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} dy\right) dx - \sigma_{yx} dx + F_x dx dy = 0 \quad (\text{II.18})$$

$$\left(\sigma_{yy} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} dy\right) dx - \sigma_{yy} dx + \left(\sigma_{xy} + \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} dx\right) dy - \sigma_{xy} dy + F_y dx dy = 0 \quad (\text{II.19})$$

Après réduction des équations (II.18) et (II.19), et en étendant le calcul de manière similaire dans la troisième dimension de l'espace, on retrouve la seconde loi de Newton, dans le cas particulier où l'accélération est nulle:

$$\sum_{j=x,y,z} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial j} + F_i = 0, \quad \text{pour } i = x, y, z \quad (\text{II.20})$$

où ρ représente la densité du corps, a_i et F_i sont les composantes des vecteurs accélération et forces extérieures, respectivement.

Le système défini par les équations (II.20) doit être satisfait en tout point du solide. Les équations qui le constituent sont appelées "les équations indéfinies d'équilibre".

II.2 Principes de la Rhéologie

Les différents matériaux utilisés pour la fabrication des circuits intégrés peuvent se déformer de manière très différente, sous l'action d'un même niveau de contraintes. Ainsi, on s'intéresse à la loi de comportement d'un matériau qui exprime la correspondance entre l'histoire des contraintes et celle des déformations. Pour un matériau donné et dans le cas le plus général, les paramètres définissant cette loi sont fonction des conditions expérimentales, telles que la température ou la pression. La science qui a pour objet d'établir ces lois de comportement s'appelle la Rhéologie. Dans un premier temps, nous en définissons les principes élémentaires en classifiant les comportements les plus couramment rencontrés: élastique, visqueux et plastique. Ceci étant, le comportement rhéologique des corps réels ne peut généralement pas se limiter à de telles lois idéales. Le recours à des modélisations plus complexes, comme la viscoélasticité ou l'élastoplasticité, est généralement requis. La dérivation de ces deux dernières lois de comportement est présentée en deuxième partie de chapitre. Par ailleurs, le lecteur souhaitant obtenir plus de détails sur ce thème sera invité à se reporter à des ouvrages de référence [4,5].

Afin d'établir les relations comportementales des matériaux, des essais classiques de caractérisation sont très communément utilisés. Les trois principaux essais sont:

- l'essai d'*écrouissage* (réponse à une déformation à vitesse constante),
- l'essai de *fluage* (réponse à un échelon de contrainte),
- l'essai de *relaxation* (réponse à un échelon de déformation).

L'allure qualitative de la réponse des matériaux à ces essais caractéristiques permet de les classer suivant différents comportements: rigide, élastique, visqueux ou plastique.

Le principe de la Rhéologie repose sur la schématisation de chaque famille de comportements à partir de modèles analogiques simples. Dans le cas uniaxial, il s'agit de la correspondance entre la contrainte σ (scalaire) et la déformation ϵ (scalaire). Les modèles analogiques sont des groupements d'éléments mécaniques élémentaires (ressort, amortisseur, patin,...) dont l'association traduit la réponse à des sollicitations similaires à celles des matériaux. Cette analogie dépend bien évidemment de l'échelle physique à laquelle ils sont identifiés: la structure cristalline, l'élément de volume,... Ils permettent une compréhension simplifiée des mécanismes macroscopiques.

Pour les modélisations complexes, les différents éléments mécaniques peuvent être assemblés en parallèle, en série, ou *via* une combinaison des deux. Les règles d'assemblage pour les cas parallèle et série sont donnés à la figure II.5.

D'un point de vue général, le comportement d'un matériau est modélisé par une relation unissant contraintes σ , déformations ϵ , vitesse de contrainte $\dot{\sigma}$ et vitesse de déformation $\dot{\epsilon}$:

$$F(\sigma, \dot{\sigma}, \epsilon, \dot{\epsilon}) = 0 \quad (\text{II.21})$$

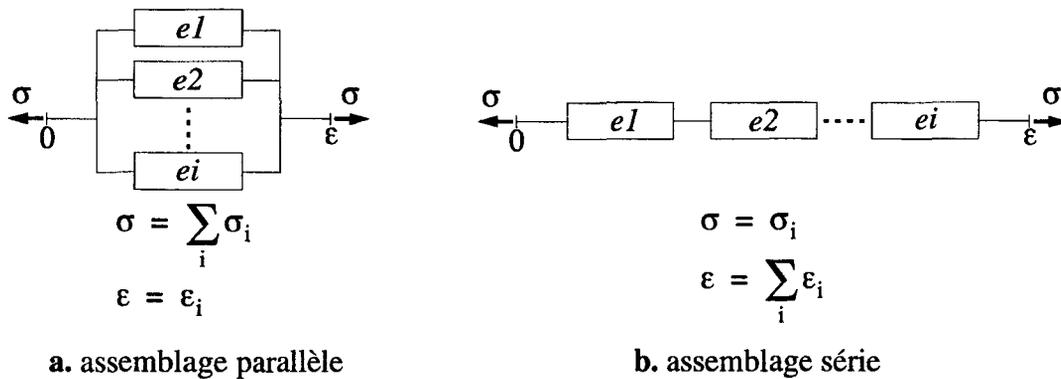


Figure II.5: Règles d'assemblages des éléments mécaniques dans le cas série (a), et dans le cas parallèle (b).

II.2.1 Lois de comportement élémentaires

II.2.1.1 L'Elasticité linéaire

Un grand nombre de matériaux suivent les lois de l'élasticité. Ce comportement se traduit par une relation linéaire entre la déformation du matériau et la contrainte qui lui est appliquée. Microscopiquement, pendant la déformation élastique, les liaisons atomiques du solide s'étirent ou se contractent, comme des ressorts idéaux, mais sans se rompre. De plus, cette dépendance est parfaitement réversible: le corps retrouve sa forme initiale dès que la charge ayant provoqué la déformation est supprimée.

A titre d'exemple, dans le domaine de la microélectronique, les monocristaux tels que le silicium sont des matériaux qui suivent la loi d'élasticité. Cependant, si les conditions du procédé induisent des déformations excessives dans le substrat de silicium, il est nécessaire de mettre en œuvre un comportement de type élastoplastique.

Nous décrivons dans les paragraphes suivant les lois de l'élasticité en considérant deux cas suivant que le matériau est anisotrope ou non.

i. Matériau anisotrope

La loi de comportement de l'élasticité linéaire, plus connue sous le nom de "Loi de Hooke", est donnée par:

$$[\sigma] = [C][\epsilon] \quad \text{où} \quad \sigma_{ij} = C_{ijkl}\epsilon_{kl} \quad (\text{II.22})$$

où $[C]$ est le tenseur d'élasticité. Les tenseurs de déformations $[\epsilon]$ et de contraintes $[\sigma]$ étant de rang 2 (i.e., 9 coefficients chacun), $[C]$ est un tenseur de rang 4 contenant 81 coefficients. A noter que la deuxième partie de l'équation (II.22) fait intervenir la notation d'Einstein où la sommation porte sur les indices répétés. Due à la symétrie de $[\epsilon]$ et $[\sigma]$, le nombre de coefficients indépendants de $[C]$ se réduit à 21. De plus, nous avons vu que les tenseurs de déformations et de contraintes peuvent se mettre sous la forme de vecteurs colonnes à 6 composantes chacun (équations (II.4) et (II.17)). Il est alors possible d'écrire le tenseur d'élasticité sous la forme d'une matrice 6x6. A noter que la deuxième partie de l'équation (II.22) fait intervenir la notation d'Einstein où la sommation porte sur les indices répétés.

Dans le cas du silicium, sa configuration cristallographique de type cubique-diamant se caractérise par une forte directionnalité des liaisons covalentes. Pour ce type de cristal à symétrie cubique, le nombre de coefficients indépendants du tenseur d'élasticité n'est plus que de 3 et la loi de Hooke devient [6]:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{xy} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{xz} \end{pmatrix} \quad (\text{II.23})$$

A température ambiante (25°C), les constantes d'élasticité ont été déterminées expérimentalement [7]:

$$\begin{aligned} c_{11} &= 1.657 \times 10^{12} \text{ dyn./cm}^2 \\ c_{12} &= 0.639 \times 10^{12} \text{ dyn./cm}^2 \\ c_{44} &= 0.796 \times 10^{12} \text{ dyn./cm}^2 \end{aligned} \quad (\text{II.24})$$

Par ailleurs, une dépendance linéaire en température de ces coefficients a également été observée [8]:

$$\begin{aligned} \frac{dc_{11}}{dT} &= -75.0 \times 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{K}^{-1} \\ \frac{dc_{12}}{dT} &= -24.5 \times 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{K}^{-1} \\ \frac{dc_{44}}{dT} &= -55.5 \times 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{K}^{-1} \end{aligned} \quad (\text{II.25})$$

On constate que cette dépendance reste limitée: la gamme de températures des procédés technologiques actuels étant typiquement d'environ [25°C-1100°C], la variation potentielle des coefficients d'élasticité reste inférieure à 10%. Nous pouvons donc, sans commettre une erreur excessive, considérer ces coefficients comme indépendants de la température.

Par définition, les coefficients définissant le tenseur d'élasticité dépendent de l'orientation cristallographique. Ainsi, le tenseur défini à l'équation (II.23) est donné dans le repère de référence du cristal (i.e., $x=[100]$, $y=[010]$, $z=[001]$). Or, il est parfois souhaitable d'exprimer les contraintes et les déformations dans des repères différents (ex: repère d'un échantillon). Il sera alors nécessaire d'effectuer une transformation tensorielle de [C] pour exprimer les lois de comportement directement dans le repère choisi.

Remarque: Tout comme le silicium, la majorité des métaux utilisés en électronique (aluminium, cuivre, tungstène) possèdent une symétrie cubique. Il conviendrait donc, en toute rigueur, d'utiliser l'équation (II.23) pour définir la relation contrainte-déformations de ces matériaux.

Néanmoins, ces matériaux tels qu'ils sont utilisés dans les édifices d'interconnexions se présentent sous la forme de polycristaux. Cela signifie qu'ils sont composés de monocristaux accolés et d'orientation souvent aléatoire. Dès lors, à une échelle suffisamment grande (i.e., si l'épaisseur du film de métal est grande devant la taille moyenne des monocristaux), le comportement *moyen* est isotrope [9].

ii. Approximation isotrope

Les circuits microélectroniques utilisent de nombreux matériaux amorphes (oxydes de silicium et nitrures de silicium). Les propriétés mécaniques de ces matériaux sont identiques dans toutes les directions de l'espace. Leur comportement est donc isotrope. Bien que le silicium soit intrinsèquement anisotrope, il est parfois préférable pour généraliser les calculs mécaniques de le considérer également comme isotrope.

L'approximation isotrope simplifie la relation contraintes-déformations. Si l'on se place dans un cas unidimensionnel, les tenseurs de contraintes et de déformations deviennent des scalaires. Leur relation s'appelle la loi de Hooke et s'écrit:

$$\sigma = E\varepsilon \tag{II.26}$$

où E correspond au Module d'Young du matériau. Comme le montre la figure II.6, cette loi peut être schématisée par un ressort de rigidité E.

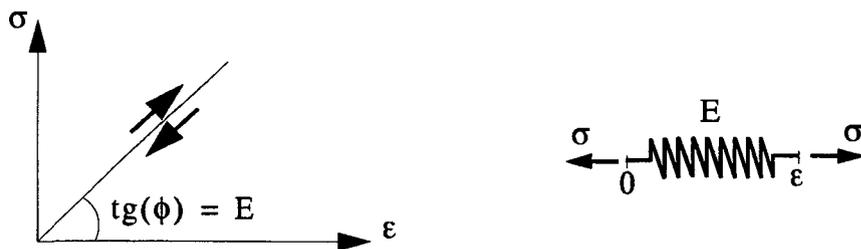


Figure II.6: Modèle schématique uniaxial du comportement élastique linéaire.

Etendons à présent cette description au cas multidimensionnel. La figure II.7 illustre le cas d'un essai en traction d'un cube constitué d'un matériau élastique. Au cours de cet essai, la section du cube sous contrainte diminue généralement. La déformation latérale est décrite par le coefficient de Poisson, ν , dont la définition est donnée à la figure II.7.

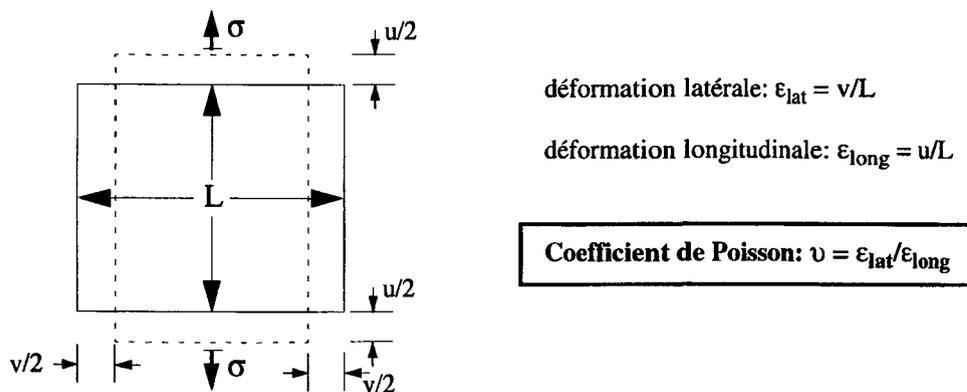


Figure II.7: Définition du coefficient de Poisson.

Dans le cas d'un matériau isotrope, le tenseur d'élasticité $[C]$ n'est alors plus défini que par deux coefficients indépendants, E et ν , qui sont respectivement le module d'Young le coefficient de Poisson.

D'un point de vue pratique, le module d'Young est une mesure de la rigidité du matériau. Dans le cas élastique, ce module correspond au rapport entre contrainte et déformation dans la direction d'application d'une sollicitation, à condition que le matériau soit libre de se déformer dans les autres directions. Puisque les déformations sont sans dimension, le module d'Young a la même dimension que les contraintes: force par unité de surface (Pa ou dynes/cm²).

Les relations qui unissent le module d'Young et le coefficient de Poisson aux coefficients de $[C]$ précédemment définis sont:

$$\begin{aligned} c_{11} &= \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \\ c_{12} &= \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \\ c_{44} &= \frac{E}{(1+\nu)} \end{aligned} \quad (\text{II.27})$$

Nous verrons comment extraire expérimentalement ces caractéristiques mécaniques au chapitre suivant.

II.2.1.2 Le comportement visqueux

La plupart des matériaux utilisés dans la fabrication des circuits ont un comportement élastique aux basses températures (<500°C) mais montrent une certaine tendance à l'écoulement, caractéristique de phénomènes visqueux, pour les hautes températures (>800°C).

La propriété de réversibilité des déformations propre aux solides élastiques n'est plus valable pour un matériau visqueux. En effet, toute contrainte appliquée au corps visqueux, si petite soit elle, produit une déformation sans cesse croissante. Elle ne cesse d'augmenter que lorsque la charge est annulée et garde alors sa valeur acquise. D'un point de vue microscopique, les liaisons atomiques composant un corps visqueux se rompent durant la déformation. De nouvelles liaisons se créent et se rompent tout au long du processus de déformation. Et après suppression de la sollicitation, ces liaisons demeurent dans leur configuration finale.

La loi de comportement la plus connue pour représenter les corps visqueux est le liquide de Newton. Ce comportement se caractérise par une relation linéaire entre la contrainte σ et la vitesse de déformation $\dot{\epsilon}$:

$$\sigma = \eta \dot{\epsilon} \quad (\text{II.28})$$

où η est la viscosité. Ce modèle linéaire ne présente pas de recouvrance (i.e., retour progressif aux dimensions et propriétés initiales, lors de la suppression des charges), par contre la relaxation des contraintes σ est instantanée.

Le comportement visqueux peut être représenté à l'aide d'un amortisseur de viscosité η , comme illustré à la figure II.8.

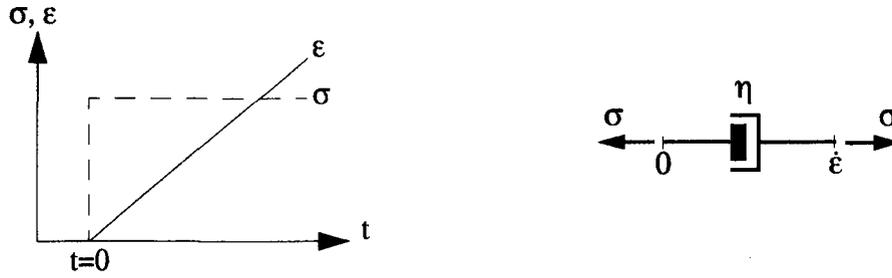


Figure II.8: Modèle schématique uniaxial du comportement visqueux linéaire.

II.2.1.3 Le comportement plastique

Le troisième et dernier comportement élémentaire qu'il reste à définir pour compléter cette classification est le comportement plastique, et plus précisément le comportement rigide parfaitement plastique. Après la cessation des sollicitations en contraintes, les solides possédant un caractère plastique présentent des déformations permanentes. Leur comportement ne dépend pas explicitement du temps.

Le modèle analogique définissant le comportement rigide parfaitement plastique est le patin, illustré à la figure II.9. La déformation est nulle ou négligeable en deçà d'une limite élastique en contrainte (σ_Y) et arbitraire pour cette valeur, quelle que soit la vitesse de déformation $\dot{\epsilon}$ (essais d'écroutissage) ou le temps (essais de fluage ou de relaxation):

$$\begin{aligned}
 |\sigma| < \sigma_Y &\rightarrow \epsilon = 0 \\
 \sigma = \sigma_Y \operatorname{sgn}(\dot{\epsilon}) &\rightarrow \epsilon = \epsilon_p \text{ (arbitraire)}
 \end{aligned}
 \tag{II.29}$$

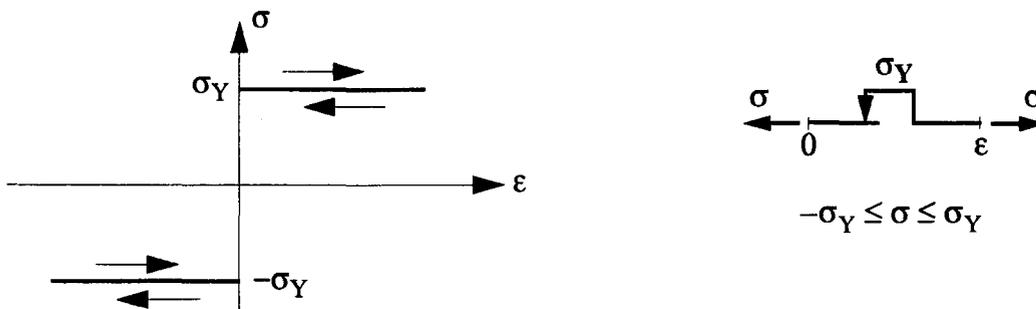


Figure II.9: Modèle schématique uniaxial du comportement rigide plastique.

Ce comportement plastique "idéal", comme les deux autres comportements élémentaires précédemment définis reproduisent de manière peu satisfaisante le comportement réel des matériaux. De manière générale, les matériaux amorphes utilisés en microélectronique (ex., les oxydes et les nitrures) sont élastiques à basse température et deviennent visqueux aux températures élevées, tandis que les matériaux cristallins ou polycristallins (ex., silicium, polysilicium, aluminium) suivent des lois de comportement élastoplastique avec une prédominance plus ou moins marquée des phénomènes plastiques. Nous allons à présent décrire les deux principaux comportements complexes qui seront utilisés pour décrire les matériaux pour ce travail: la viscoélasticité et l'élastoplasticité.

II.2.2 Lois de comportement complexes

Pour définir les comportements complexes, nous exploitons le principe de décomposition des tenseurs de déformations (et de contraintes) en partie sphérique et déviatorique. Le comportement d'un matériau se trouve alors caractérisé par deux lois distinctes, dérivées de la formulation générale de l'équation (II.21). Pour la partie sphérique, on définit l'équation de dilatation:

$$F^v(\sigma^v, \dot{\sigma}^v, \varepsilon^v, \dot{\varepsilon}^v) = 0 \quad (\text{II.30})$$

Pour la partie de déviation, l'équation correspondante est:

$$F^s(\sigma^s, \dot{\sigma}^s, \varepsilon^s, \dot{\varepsilon}^s) = 0 \quad (\text{II.31})$$

Cette décomposition se justifie par le fait que de nombreux matériaux ont des réponses aux essais en cisaillement et en compression/contraction très différentes. Ainsi, la grande majorité des matériaux présentent des réponses de type élastique sous une sollicitation purement hydrostatique (partie sphérique). Les caractères visqueux ou plastiques ne sont révélés que lors d'essais en cisaillement (partie déviation).

En conséquence, les comportements complexes présentés maintenant (viscoélasticité, élastoplasticité, viscoplasticité) sont appliqués à l'équation constitutive de déviation F^s du corps. La composante de dilatation F^v reste élastique dans tous les cas et est modélisée par un ressort.

II.2.2.1 Le comportement viscoélastique

Il est reconnu que certains matériaux se déforment en présentant à la fois un caractère élastique et visqueux. Le comportement de ces matériaux est qualifié de viscoélastique. Celui-ci se caractérise par une dépendance de la vitesse de déformation avec la contrainte appliquée.

Plusieurs modèles ont été formulés pour reproduire le comportement viscoélastique. Nous présentons ici les deux formulations les plus largement acceptées: l'élément de Maxwell et l'élément de Kelvin-Voigt.

L'*élément de Maxwell* est représenté par l'association en série d'un ressort et d'un amortisseur (figure II.10.a). La déformation totale d'un tel élément est donc la somme de la déformation élastique ε_e (ressort) et de la déformation visqueuse ε_v (amortisseur):

$$\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_v \quad (\text{II.32})$$

L'équation constitutive de l'élément de Maxwell peut alors s'écrire:

$$\dot{\varepsilon} = \frac{\dot{\sigma}}{G} + \frac{\sigma}{\eta} \quad (\text{II.33})$$

où G représente le module d'élasticité et η la viscosité du matériau. La partie visqueuse de l'élément induit une dépendance temporelle de la réponse avec une certaine constante de temps caractéristique ($\tau = \eta/G$). Un tel élément peut donc subir à la fois une déformation instantanée, lorsqu'on lui applique une sollicitation, et une relaxation des contraintes dans le temps.

L'élément de Kelvin-Voigt utilise la modélisation duale de l'élément de Maxwell, à savoir l'association en parallèle d'un ressort et d'un amortisseur (figure II.10.b). Dans ce cas, la contrainte totale est la somme de la contrainte élastique σ_e et de la contrainte visqueuse σ_v :

$$\sigma = \sigma_e + \sigma_v \quad (\text{II.34})$$

L'équation constitutive de l'élément de Kelvin-Voigt est:

$$\sigma = G\varepsilon + \eta\dot{\varepsilon} \quad (\text{II.35})$$

Le modèle de Kelvin-Voigt implique que:

- i) les déformations ne peuvent être instantanées (l'amortisseur interdit toute déformation brutale);
- ii) sous un niveau de charge en contrainte constant σ_0 , les déformations ne peuvent augmenter indéfiniment et saturent à la limite élastique σ_0/G . Il est donc possible d'atteindre un équilibre à contrainte constante non nulle, contrairement à l'élément de Maxwell.

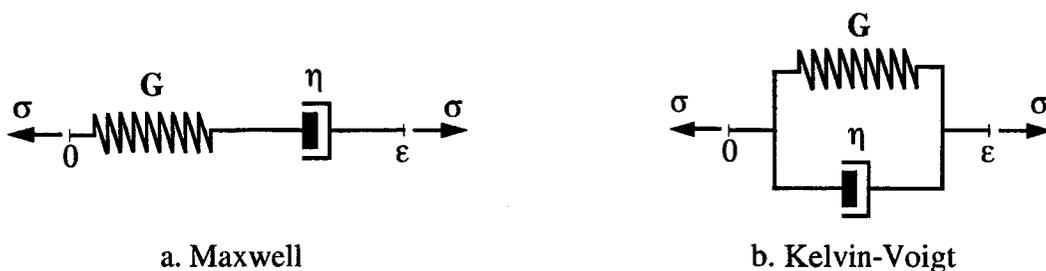


Figure II.10: Eléments viscoélastiques; élément de Maxwell (a) et élément de Kelvin-Voigt (b).

Comme déjà mentionné, le comportement d'un corps est défini par la connaissance des équations constitutives de dilatation F^V et de déviation F^S . Un corps viscoélastique est appelé *liquide de Maxwell* ou *solide de Kelvin-Voigt*, suivant que l'on utilise l'élément de Maxwell ou de Kelvin-Voigt pour décrire la composante de déviation (les qualificatifs "liquide" ou "solide" proviennent du caractère infini ou non des déformations dans le cas d'un essai de fluage). La composante de dilatation reste dans les deux cas élastique.

Néanmoins, il est reconnu que certains matériaux utilisés en microélectronique, comme le dioxyde de silicium (SiO_2), peuvent subir des déformations visqueuses irréversibles à hautes températures. Le ressort associé en parallèle dans le modèle de Kelvin-Voigt interdit toutes déformations résiduelles après un cycle de charge-décharge en contrainte. De ce fait, la modélisation de la viscoélasticité implantée dans le simulateur sera celle du liquide de Maxwell. C'est l'approche la plus couramment rencontrée dans les études similaires [12,13].

Pour compléter cette modélisation rhéologique, il est nécessaire de se rappeler que les mesures de viscosité de la silice en volume [14] donnent des valeurs très élevées, même à haute

température ($\sim 10^{18}$ Poises à 1000°C). Par conséquent, si l'on utilise ces valeurs, le temps de relaxation correspondant est très grand. Cela empêche la relaxation des contraintes élevées, localisées autour des coins de tranchées oxydées, qui devraient générer systématiquement des dislocations dans le silicium. Or, l'expérience montre que l'oxyde subit des déformations très importantes à ces singularités topographiques et qu'aucune dislocation n'apparaît dans le substrat [15]. Cette expérience suggère que la viscosité diminue lorsque les contraintes deviennent importantes. Autrement dit, l'écoulement de l'oxyde n'est plus Newtonien (à viscosité constante) et la silice est un matériau non-linéaire. Dans la plupart des cas, on observe un comportement fluidifiant (diminution de la viscosité lorsque les contraintes augmentent).

Dans le cas du dioxyde et du nitrure de silicium, cet effet est introduit par le biais du modèle d'Eyring [16]:

$$\eta(\sigma, T) = \eta_0(T) \cdot \frac{\left(\frac{\sigma_{\max}}{\sigma_0(T)}\right)}{\sinh\left(\frac{\sigma_{\max}}{\sigma_0(T)}\right)} \quad (\text{II.36})$$

où $\eta_0(T)$ est la viscosité à faible niveau de contraintes; $\sigma_0(T)$ est la valeur critique de cisaillement au-delà de laquelle le matériau devient fortement non-linéaire et σ_{\max} est la contrainte de cisaillement maximale. Les deux premiers paramètres sont fonction de la température. D'après la théorie de Eyring, $\sigma_0(T)$ représente le travail nécessaire que doivent fournir les contraintes de cisaillement pour rompre les molécules du matériau:

$$\sigma_0(T) = \frac{2kT}{V_c} \quad (\text{II.37})$$

où k est 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 ont montré qu'il était nécessaire d'utiliser V_c comme un paramètre d'ajustement pour obtenir de bons accords [17].

La dépendance de la viscosité vis à vis des contraintes, qui sont par ailleurs les inconnues du problème mécanique à résoudre, fait que l'on qualifie de "non-linéaire" ce type de viscoélasticité.

II.2.2.2 Le comportement élastoplastique

Si la présente étude se limite à la modélisation des contraintes mécaniques engendrées pendant toutes les étapes de fabrication des composants ("front-end"), les approches élastiques et viscoélastiques suffisent à modéliser, avec une relativement bonne approximation, tous les matériaux utilisés. Néanmoins, on souhaite étendre l'étude aux contraintes issues des étapes de réalisation des édifices d'interconnexions ("back-end"). Or, les interconnexions des procédés actuels font appel à un grand nombre de métaux, certains possédant des comportements plastiques fortement marqués (alliages d'aluminium, alliages de cuivre) [10-11, 18-19]. D'où la nécessité d'introduire des modèles d'élastoplasticité, et même de viscoplasticité.

Pour définir concrètement la notion de plasticité, prenons un exemple simple: considérons un essai en traction sur un barreau cylindrique d'acier et analysons sa réponse (figure II.11).

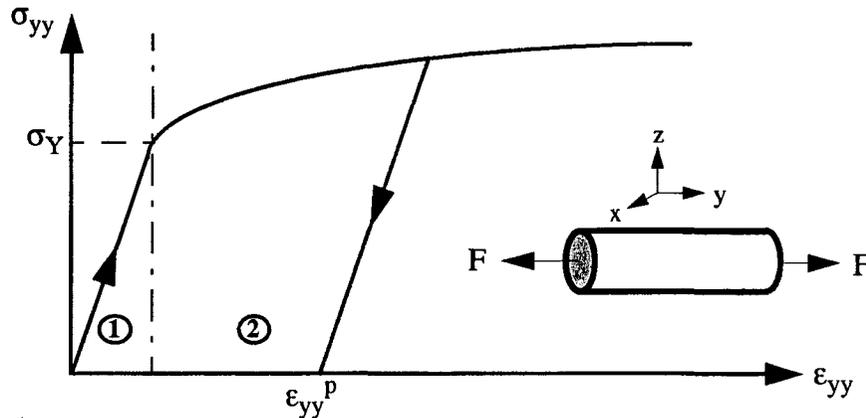


Figure II.11: Courbe de traction classique obtenue pour un matériau élastoplastique.

Dans une première phase (région 1), le matériau est linéaire élastique et la décharge est réversible: on se trouve dans le domaine d'élasticité.

Si l'on dépasse un certain seuil de contrainte σ_Y (i.e., limite d'élasticité), le comportement devient non-linéaire (région 2). En effectuant une décharge dans cette zone, on note l'apparition d'une déformation résiduelle (ϵ_{yy}^P) et le déchargement s'opère selon une droite de type élastique avec un module égal au module d'élasticité initial. La déformation résiduelle irréversible ϵ_{yy}^P représente la déformation plastique subie par le matériau lors de l'essai.

La modélisation du comportement élastoplastique développé pour ce travail est basé sur un traitement numérique très classique de la plasticité, très largement exploité dans les simulateurs commerciaux d'analyse structurale [20,21]. Nous en présentons les principales caractéristiques ci-dessous et nous détaillerons les aspects numériques au chapitre IV.

Commençons pas redéfinir la notion de limite élastique et de critères de plasticité dans le cas le plus général.

Comme illustré à la figure II.11, la limite d'élasticité unidimensionnelle est définie par le scalaire σ_Y , qui correspond à la limite du régime linéaire contraintes/déformations dans le domaine d'élasticité dans l'espace de la contrainte à une dimension.

La généralisation de cette notion au cas tridimensionnel est le critère de plasticité [22]. Il définit le domaine, dans l'espace des contraintes à 6 dimensions, à l'intérieur duquel toute variation de contrainte n'engendre que des variations de déformation élastique. La figure II.12 illustre une surface limite élastique f typique pour un essai de traction-torsion d'un tube mince élastoplastique (ex: aluminium).

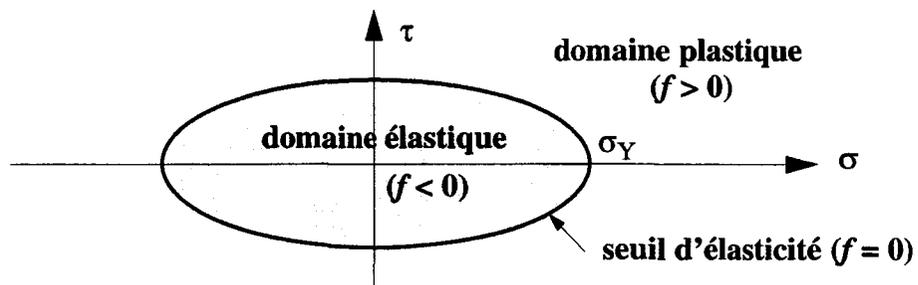


Figure II.12: Surface limite élastique f d'un matériau élastoplastique.

La surface f est représentée dans le plan des contraintes (σ, τ) qui sont les contraintes normales et tangentielles à la section du tube (cf. figure II.1).

i. Critères de plasticité

Pour simplifier la modélisation, nous ne considérons que des critères isotropes de plasticité [22]. L'équation de la frontière du domaine fait intervenir à priori toutes les composantes du tenseur des contraintes et la variable définissant la limite délasticité (i.e., le scalaire σ_Y):

$$f(\sigma_{ij}, \sigma_Y) = 0 \quad (\text{II.38})$$

Dans les matériaux métalliques, on observe généralement l'incompressibilité plastique et l'indépendance du comportement vis-à-vis de la contrainte hydrostatique [22]. Cet état de fait justifie la décomposition générale des lois de comportement, adoptée jusqu'à présent, en parties sphérique et déviatorique. Pour ce type de matériaux, seule la partie de déviation suivra une loi élastoplastique, la partie sphérique restant purement élastique. Par ailleurs, l'isotropie impose que la frontière du domaine soit invariante par changement de repère. On peut alors montrer que la fonction f ne dépend plus que de deux des trois invariants du tenseur de déviation σ^s [22]:

$$f(s_{II}, s_{III}, \sigma_Y) = 0 \quad (\text{II.39})$$

où s_{II} et s_{III} sont les invariants du tenseur σ^s ($s_{II} = \frac{1}{2} \text{Tr}\{(\sigma^s)^2\}$ et $s_{III} = \frac{1}{3} \text{Tr}\{(\sigma^s)^3\}$).

Deux critères isotropes sont souvent utilisés pour expliciter la fonction f : le critère de Tresca et le critère de Von Mises.

Le critère de Tresca définit la limite d'élasticité en se basant sur la notion de contrainte de cisaillement maximale, qui s'exprime dans le repère principal par:

$$\tau_{\max} = \frac{1}{2} \text{Sup}_{i \neq j} |\sigma_{ii} - \sigma_{jj}| \text{ avec } (i, j) = (x, y, z) \quad (\text{II.40})$$

En analyse bidimensionnelle et en faisant l'hypothèse des déformations planes (cf. §II.4.1), la représentation de Mohr permet d'exprimer la contrainte tangentielle maximale τ_{\max} en fonction des composantes σ_{xx} , σ_{yy} et σ_{xy} [1]:

$$\tau_{\max} = \pm \sqrt{\frac{(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2}{4} + \sigma_{xy}^2} \quad (\text{II.41})$$

Le critère de Tresca impose donc que $\tau_{\max} < \sigma_Y$, où σ_Y représente, dans ce cas, une contrainte de cisaillement limite.

Pour le critère de Von-Mises, on considère que la limite d'élasticité est liée à l'énergie élastique de cisaillement [22]. Cela revient à négliger l'influence du troisième invariant s_{III} dans l'équation (II.39) et à prendre une fonction linéaire pour la fonction f . On peut alors exprimer la fonction $f(s_{II}, \sigma_Y) = 0$ par la relation:

$$f = \sigma_{\text{eq}} - \sigma_Y = 0 \quad \text{avec } \sigma_{\text{eq}} = \sqrt{3s_{II}} \quad (\text{II.42})$$

où σ_{eq} représente un état de contrainte complexe équivalent, au sens de Von Mises, à l'état unidimensionnel défini par la limite d'élasticité σ_Y . L'expression développée du critère de Von Mises dans le cas général tridimensionnel est:

$$\frac{1}{2}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^2 + 6(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{yz}^2 + \sigma_{zx}^2)] - \sigma_Y^2 = 0 \quad (\text{II.43})$$

Les deux critères présentés sont sensiblement équivalents d'un point de vue théorique. Néanmoins, d'un point de vue numérique, le critère de Von Mises est souvent préféré à celui de Tresca car il est continu [22].

ii. Modélisation analogique

Le modèle analogique (unidimensionnel) de l'élastoplasticité est le *modèle de Saint-Venant*, qui associe un ressort d'élasticité G en série avec un patin de limite d'élasticité σ_Y , comme illustré à la figure II.13.



Figure II.13: Élément analogique de l'élastoplasticité (modèle de Saint-Venant).

Pour une contrainte égale à la limite d'élasticité σ_Y , la déformation est arbitraire et indépendante de la vitesse de déformation:

$$\begin{aligned} |\sigma| < \sigma_Y &\rightarrow \varepsilon = \varepsilon_e = \frac{\sigma}{G} \\ \sigma = \sigma_Y \operatorname{sgn}(\dot{\varepsilon}) &\rightarrow \varepsilon = \frac{\sigma}{G} + \varepsilon_p \quad (\text{arbitraire}) \end{aligned} \quad (\text{II.44})$$

où ε_p représente la déformation plastique irréversible.

Dans notre étude, la modélisation du comportement élastoplastique est appliquée à certains métaux (alliages d'aluminium et de cuivre) et au silicium.

II.2.2.3 Le comportement viscoplastique

Certains matériaux aux comportements plastiques fortement marqués sont caractérisés par une évolution temporelle des déformations permanentes, et ce, même à basse température. C'est notamment le cas des alliages d'aluminium qui subissent une relaxation des contraintes à température ambiante *via* un mécanisme de "fluage-dislocation" [23,24], comme l'atteste la figure II.14. Ici sont considérés des alliages d'aluminium-cuivre et d'aluminium-silicium-cuivre.

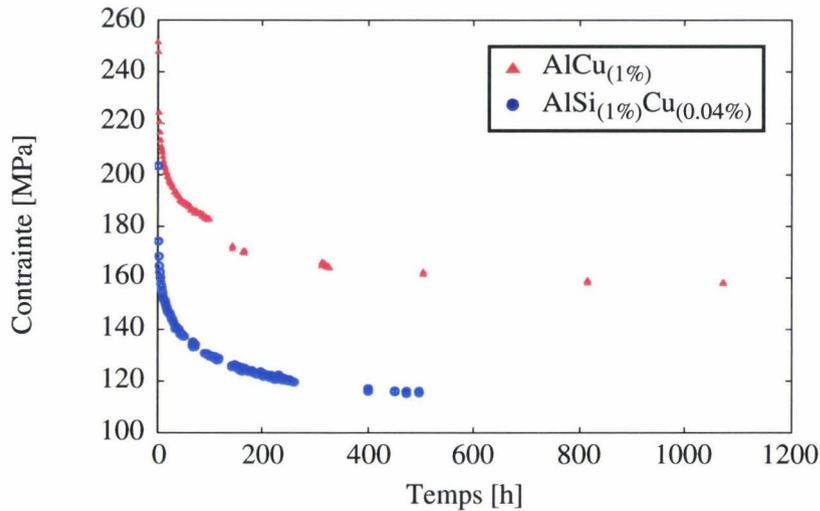


Figure II.14: Relaxation des contraintes pour des alliages d'aluminium [25].

Le modèle le plus généralement employé pour représenter le comportement d'un solide élastique parfaitement viscoplastique et le *élément de Bingham-Norton*, illustré à la figure II.15. La seule différence par rapport au modèle de Saint-Venant réside dans l'ajout d'un amortisseur non-linéaire en parallèle avec le patin, afin de permettre la relaxation des déformations.

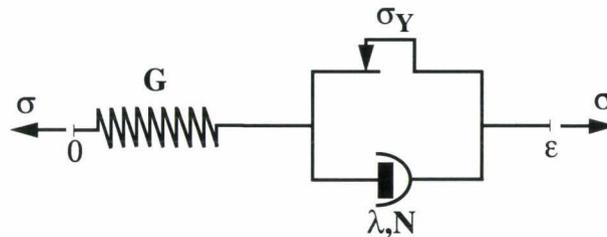


Figure II.15: Élément élastique parfaitement viscoplastique de Bingham-Norton.

Les lois constitutives de ce modèle sont:

$$\begin{aligned}
 |\sigma| < \sigma_Y &\rightarrow \sigma = G\varepsilon \\
 |\sigma| \geq \sigma_Y &\rightarrow \sigma = G\varepsilon_e = \sigma_Y + \lambda \dot{\varepsilon}_p^{1/N} \quad (\text{avec } \varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_p)
 \end{aligned}
 \tag{II.45}$$

où $\dot{\varepsilon}_p$ représente la vitesse de déformation plastique et ε_e est la déformation élastique.

Zienkiewicz et Corneau ont démontré la faisabilité d'implanter le modèle de Bingham-Norton pour traiter le comportement viscoplastique par la méthode des éléments finis [26]. Néanmoins, les problèmes inhérents au traitement temporel des non-linéarités affectent sévèrement la stabilité numérique de la méthode. Bien que l'élaboration d'un modèle de viscoélastoplasticité soit nécessaire pour une modélisation complète des matériaux comme les alliages d'aluminium-cuivre, nous simplifierons notre modélisation en faisant abstraction des phénomènes de relaxation viscoplastique.

II.2.3 Bilan: classification des lois de comportements

Les comportements rhéologiques des matériaux utilisés dans le domaine de la microélectronique couvrent un large spectre. Leur modélisation utilise des assemblages d'éléments mécaniques simples (ressort, piston, patin,...). La figure II.16 synthétise les lois de comportements définies précédemment. Deux comportements supplémentaires apparaissent également sur cette figure: le solide d'Euclide et le liquide de Pascal. Ces deux comportements présentent peu d'intérêt en ce qui nous concerne, car ils représentent des situations physiques extrêmes ne décrivant pas le comportement des matériaux utilisés dans cette étude. En effet, le solide d'Euclide correspond à un solide idéal qui ne se déforme pas, même sous l'action de forces importantes. Le liquide de Pascal est un liquide idéal, incompressible et de mobilité infinie.

Bien qu'intuitivement évidente, la distinction entre solides et liquides n'est pas aussi franche qu'il n'y paraît. En principe, le liquide soumis à une pression hydrostatique ne se déforme que d'une quantité finie, tandis qu'une contrainte de cisaillement (scission), même faible, provoque un écoulement infini. Au contraire, la déformation d'un solide reste finie dans les deux cas, tant que le cisaillement ne dépasse pas un certain seuil. La viscosité du corps, qui par définition représente la résistance aux glissements des couches élémentaires les unes par rapport aux autres, permet la distinction entre liquide et solide. Néanmoins, certains matériaux aux comportements complexes (élastoplastiques ou viscoplastiques) pourront être considérés, suivant les conditions expérimentales (température, cisaillement,...), comme des liquides ou des solides.

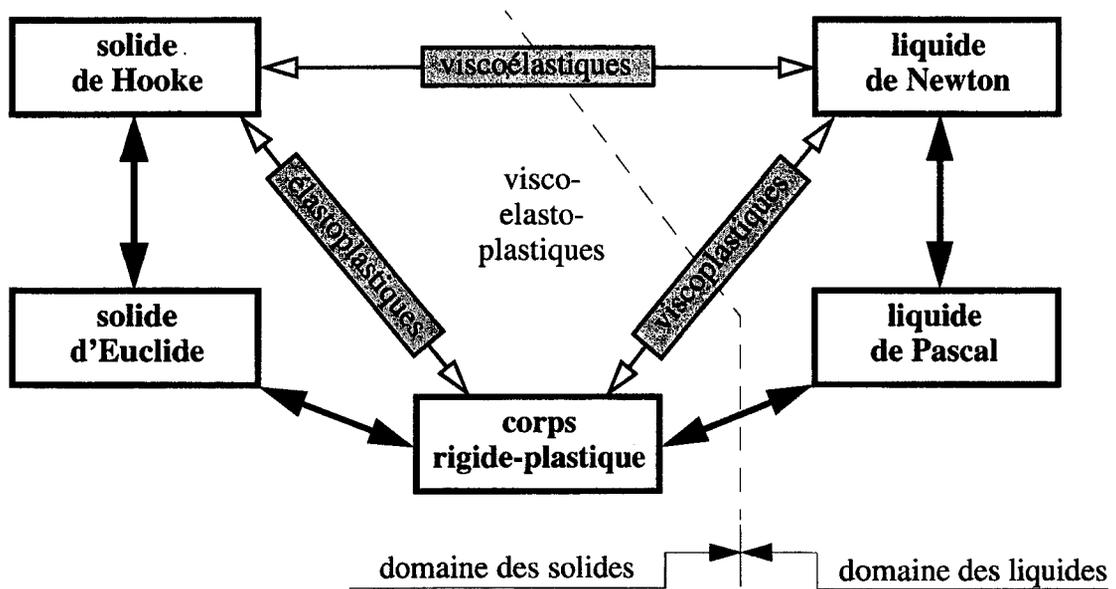


Figure II.16: Classification schématique des comportements rhéologiques.

II.3 Mise en œuvre de la méthode des éléments finis

II.3.1 Principes de base

Ce paragraphe a pour objectif de rappeler les bases de la méthode des éléments finis, considérée comme la méthode standard de résolution des calculs de structures. Le lecteur souhaitant connaître avec plus de détails le formalisme de cette méthode, est invité à se référer à des ouvrages spécialisés [27,28].

Le principe général de la méthode des éléments finis repose sur la discrétisation spatiale d'un domaine continu en éléments (ex.: triangles) reliés uniquement en un nombre fini de points nodaux (les "nœuds" du maillage), comme cela est illustré à la figure II.17. Les inconnues du problème sont résolues uniquement aux nœuds du maillage. Il est possible de résoudre de nombreux types de problèmes et les inconnues peuvent avoir différentes significations physiques (ex.: température, déplacement, concentration, potentiel,...). Dans le cas du calcul de structures, les inconnues nodales sont les déplacements.

Par ailleurs, de nombreux types d'éléments finis peuvent être développés. La structure représentée à la figure II.17 est maillée avec les éléments 2D les plus simples: les triangles linéaires (la linéarité provient du type de fonction d'interpolation considérée). Un élément fini typique de type simplexe est défini en 2D par trois nœuds i, j, m , et 3 arêtes. Si on considère que les inconnues sont les déplacements, ceux-ci peuvent se mettre sous la forme d'un vecteur colonne, $\{f(x, y)\}$, défini en tout point intérieur de l'élément:

$$\{f\} = [N]\{\delta\}^e = [N_i, N_j, N_k] \begin{Bmatrix} \delta_i \\ \delta_j \\ \delta_k \end{Bmatrix} \quad (\text{II.46})$$

où $[N]$ correspond aux fonctions de forme (i.e., ce sont les fonctions d'interpolation qui permettent d'exprimer les déplacements en tout point intérieur a l'élément e) et $\{\delta\}^e$ est constitué par le tableau des déplacements nodaux de l'élément considéré, c'est-à-dire:

$$\{\delta_i\} = \begin{Bmatrix} u_i \\ v_i \end{Bmatrix}, \quad \{\delta_j\} = \begin{Bmatrix} u_j \\ v_j \end{Bmatrix}, \text{ et } \{\delta_k\} = \begin{Bmatrix} u_k \\ v_k \end{Bmatrix} \quad (\text{II.47})$$

Une fois connus les déplacements en chaque nœud de la structure, il est possible de connaître les déformations et contraintes correspondantes en utilisant les propriétés rhéologiques des matériaux mis en œuvre.

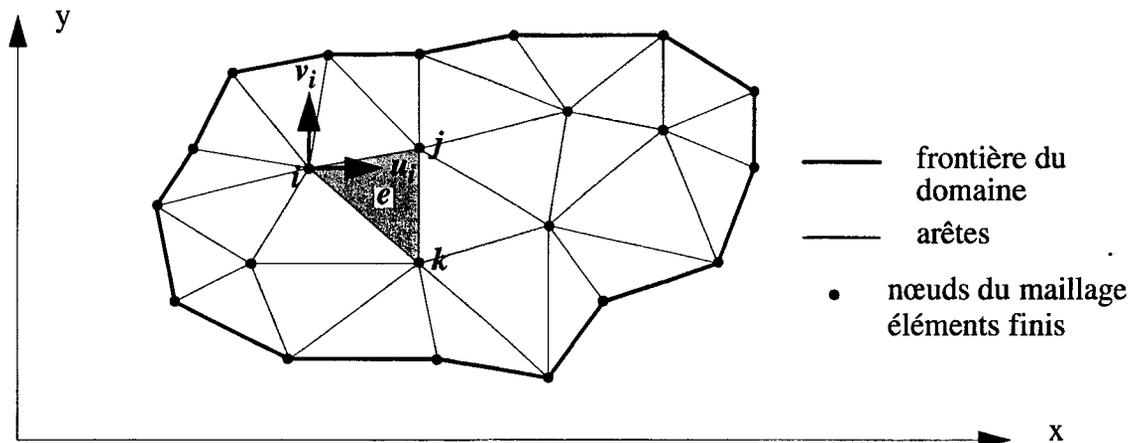


Figure II.17: Domaine 2D quelconque décomposé en éléments finis triangulaires.

Le calcul des contraintes mécaniques est basé sur la résolution des équations d'équilibre (équations (II.20)). Il s'agit donc d'évaluer dans un premier temps la contribution globale des forces extérieures en chaque nœud du domaine. On notera $\{F\}^e$ la matrice des forces nodales équivalentes aux différentes charges appliquées (ex., charges ponctuelles, surfaciques ou volumiques; charges provenant de déformations ou de contraintes initiales;...). Les composantes de $\{F\}^e$ sont les vecteurs forces équivalentes des trois nœuds de l'élément e .

Pour la résolution numérique du problème mécanique, tout calcul par éléments finis suit une procédure décomposable en quatre étapes:

- i. La première étape est la détermination des propriétés de chaque élément à partir de données sur sa géométrie, sur le matériau dont il est constitué et sur sa loi de comportement. Pour chaque élément, on évalue les forces nodales ainsi que la *matrice de raideur*, qui détermine la relation entre forces appliquées et déplacements.
- ii. La deuxième étape est l'*assemblage* des équations pour obtenir un système global linéaire. Le système est mis sous forme matricielle pour faciliter la résolution numérique.
- iii. La troisième étape est l'introduction des *conditions aux limites* imposées dans la matrice globale. Nous présentons au paragraphe suivant les différentes conditions aux limites rencontrées en mécanique.
- iv. La quatrième et dernière étape consiste à *résoudre* le système d'équations qui résulte de l'assemblage. Pour cela, il est possible d'employer des méthodes directes ou indirectes. La résolution du système permet alors de calculer les déformations et contraintes en chaque nœud du domaine discrétisé.

II.3.2 Les conditions aux limites

Pour déterminer une solution unique lors de la résolution du système assemblé, les conditions aux limites choisies doivent respecter certains critères afin d'assurer l'équilibre mécanique de la structure. Les conditions aux limites "minimales" pour la stabilité sont satisfaites si la structure ne peut pas se déplacer sans se déformer (c'est-à-dire que les translations et rotations globales sont interdites). Pour un corps bidimensionnel, ces conditions peuvent être remplies en spécifiant des conditions aux limites pour seulement deux points de la frontière du corps: un point doit être fixe et l'autre point restreint à se déplacer dans une seule direction. La figure II.18 représente une configuration possible de ces conditions aux limites "minimales". Dans IMPACT, le point fixe est généralement confondu avec l'origine des coordonnées.

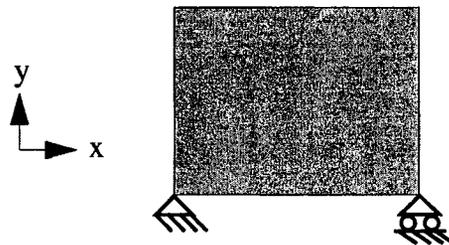


Figure II.18: Illustration des degrés de liberté mécaniques associés aux conditions aux limites "minimales".

Deux types différents de conditions aux limites (CL) sont utilisées: les conditions de Dirichlet et les conditions de Neumann "flottantes". Des CL de Dirichlet fixent la valeur de l'inconnue (en l'occurrence le déplacement) le long de la limite, tandis que des CL de Neumann "flottantes" forcent la dérivée de l'inconnue à être constante sur la limite.

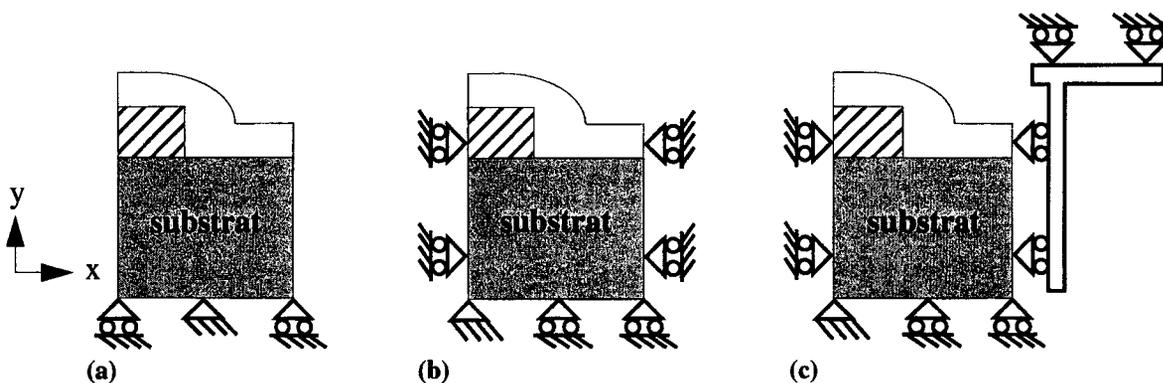


Figure II.19: Principales applications des conditions aux limites en 2D: CL "libres" (a), CL symétriques classiques (b), et CL symétriques modifiées (c).

La figure II.19 illustre schématiquement les trois configurations possibles, en ce qui concerne l'application des conditions aux limites, disponibles dans IMPACT.

Si aucune condition n'est appliquée sur les bords du domaine de simulation, on parlera de conditions aux limites "libres" (figure II.19.a). Cette configuration n'est utilisable que si les bords du domaine correspondent effectivement aux limites physiques de la structure. Elles ne seront donc utilisées dans la pratique que si l'on simule la tranche complète. Cependant, l'architecture d'un circuit complexe fait appel à la répétition d'un motif de base et ce motif est

de taille très petite par rapport à celle du substrat (ex: la cellule de base d'un transistor fait typiquement $\sim 2\text{-}3\mu\text{m}$ de large et $\sim 1\mu\text{m}$ de profondeur, à comparer aux $500\mu\text{m}$ d'épaisseur et 200mm de diamètre d'une tranche de silicium standard). Il est alors préférable d'exploiter la périodicité de cette architecture en ne simulant qu'un motif de base.

Une simplification très couramment employée pour modéliser cette périodicité consiste à utiliser des conditions de symétrie "classiques" sur les bords [29,30] (figure II.19.b). Elles sont définies par l'application des conditions de Dirichlet en interdisant tout déplacement en x ($u_x = 0$). Cifuentes a observé que les contraintes prédites avec cette approximation ne sont pas valables dans ce cas car elles interdisent une déformation globale latéralement [31]. Si l'on considère le cas d'une variation thermique, comme tout changement de dimensions latérales est prescrit, il en résulte une contribution artificielle en compression ou en tension suivant qu'il s'agisse d'une montée ou d'une descente en température. Cifuentes a démontré que la périodicité nécessite l'application de conditions de Neumann "flottantes" sur les bords en forçant les déplacements latéraux (u_x) à être constants. Comme un point du domaine doit être fixé, un choix naturel consiste à fixer u_x à zéro sur le bord gauche et d'appliquer la condition $u_x = \text{constante}$ sur le bord droit comme cela est schématisé à la figure II.19.c. C'est cette configuration de conditions aux limites qui est activée par défaut pour toute analyse structurale avec IMPACT.

Notons tout par ailleurs que la partie inférieure du substrat est traitée de manière identique dans les trois cas en imposant des conditions de Dirichlet qui interdisent tout déplacement en y ($u_y=0$). Les conditions de symétrie ainsi appliquées au bas du domaine de simulation ne correspondent pas à une réalité physique mais cette approximation n'affecte pas les résultats tant que l'épaisseur de substrat considérée pour la simulation reste grande par rapport aux dimensions des motifs de base.

Nous allons valider par un exemple le choix des conditions aux limites modifiées définies à la figure II.19.c.

Exemple: La structure de test considérée est définie à la figure II.20. Dans un substrat de silicium de $16\mu\text{m}$ de large par $3\mu\text{m}$ d'épaisseur, 8 isolations par tranchées d'oxyde ont été réalisées de manière à former un réseau périodique. Par raison de symétrie, seule une demi-structure est simulée en annulant les déplacements u_x sur le bord définissant l'axe de symétrie.

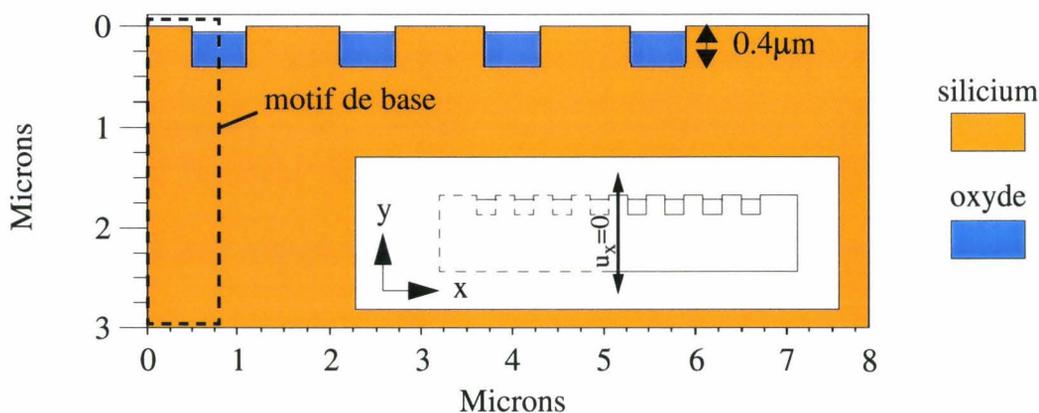


Figure II.20: Description de la demi-structure de test (encart: structure complète).

Nous simulons alors les contraintes engendrées lors d'une montée en température, après formation des zones d'isolation. La figure II.21.a représente les contraintes latérales σ_{xx} dans le substrat juste en dessous des tranchées ($y=0.45\mu\text{m}$). Pour cette simulation, le bord droit est laissé libre puisqu'il correspond à la limite physique de la structure. De ce fait, la contrainte σ_{xx} s'annule de manière naturelle sur ce bord. Par ailleurs, on constate que la courbe de contrainte se reproduit de manière périodique lorsque l'on est suffisamment loin du bord (à partir de la 2^{ème} ou 3^{ème} isolation). L'effet du bord libre n'a alors plus de répercussions sur les niveaux de contraintes. Comparons alors ces contraintes de référence avec celles obtenues en ne considérant plus qu'un motif de base (cf. figure II.20), et en appliquant les conditions aux limites classiques et modifiées (figure II.21.b).

On constate qu'avec les conditions classiques, les contraintes sont plus compressives (ou moins tensiles). Cela provient de l'effet mentionné plus haut de confinement latéral artificiel induit par ces conditions aux limites. Par ailleurs, les conditions modifiées en suivant les recommandations de Cifuentes permettent d'obtenir un excellent accord avec les contraintes issues du calcul complet.

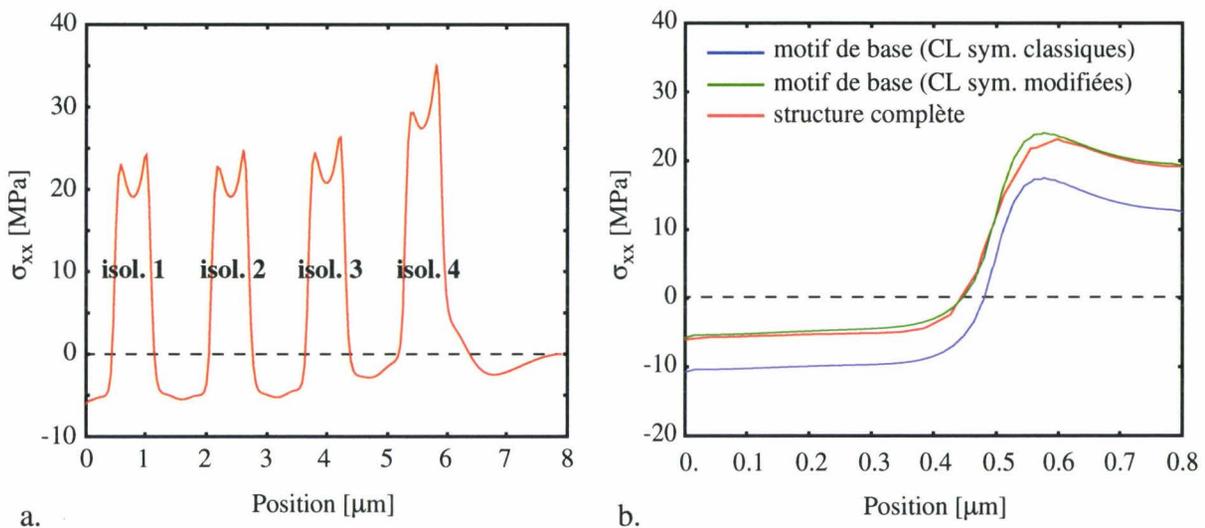


Figure II.21: Contrainte normale σ_{xx} dans le silicium à $y=0.45\mu\text{m}$; demi-structure (a); comparaison pour différentes CL sur un motif de base (cf. figure II.20) (b).

La description des conditions aux limites a été présentée dans le cadre de simulation bidimensionnelle et sont directement transposables en 3D.

II.3.3 Le maillage

Nous avons déjà introduit au paragraphe §II.3.1 le principe de la discrétisation spatiale d'une structure sous formes d'éléments simples, principe qui est la base de la méthode des éléments finis. Il existe plusieurs stratégies concernant la gestion du maillage ainsi généré pendant les différentes étapes de simulation. En effet, de nombreuses étapes de fabrication des circuits intégrés mettent en jeu des changements de volume et/ou déformations de matériau importants (ex: création des zones d'isolation par oxydation longue du silicium).

Une technique consiste à conserver le maillage initial et à le déformer pour suivre au

mieux la nouvelle géométrie. Si nécessaire, des nœuds sont ajoutés sur les nouvelles frontières des matériaux [32,33]. 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 dans IMPACT, car elle permet d'obtenir des temps de calcul raisonnables et une bonne précision de calcul. Malheureusement, la transposition en 3D de cette stratégie n'est pas permise, car il n'existe pas à l'heure actuelle d'outils de remaillage 3D de géométrie quelconque. A titre d'exemple, les algorithmes permettant d'améliorer la qualité du maillage d'une surface quelconque en 2D existent depuis longtemps [34], mais l'existence d'une solution n'est toujours pas établie en 3D. Ces déficiences expliquent les nombreux efforts de recherche qui sont actuellement menés pour mettre au point un "mailleur 3D" suffisamment robuste [35,36]. Pour la simulation 3D, nous employons la première stratégie présentée (i.e., conservation du maillage initial).

Afin de réduire au maximum les temps de calculs, il est fondamental d'utiliser des éléments simples dans la formulation éléments finis. Des éléments triangulaires à 3 nœuds ayant des fonctions de formes linéaires (éléments triangulaires P1) sont donc utilisés en 2D [27]. Dans le cas tri-dimensionnel, il s'agira de tétraèdres.

Dans le simulateur de technologies IMPACT-4 [37], chaque matériau est défini géométriquement par une enveloppe, déterminée par une suite de points ("*string model*"), espacés par un pas de maillage de référence. C'est à partir de ces points, nœuds à part entière du maillage "éléments finis", que la triangulation est systématiquement réalisée en trois étapes, à l'aide du mailler bidimensionnel MSHPTS, développé à l'INRIA [38]:

1. une grille régulière de points est superposée aux nœuds définissant l'enveloppe du domaine,
2. la triangulation est effectuée selon le critère de Delaunay [38],
3. une procédure itérative de régularisation est réalisée pour améliorer les formes des éléments du domaine.

Un schéma synthétisant ces étapes est présenté à la figure II.22.

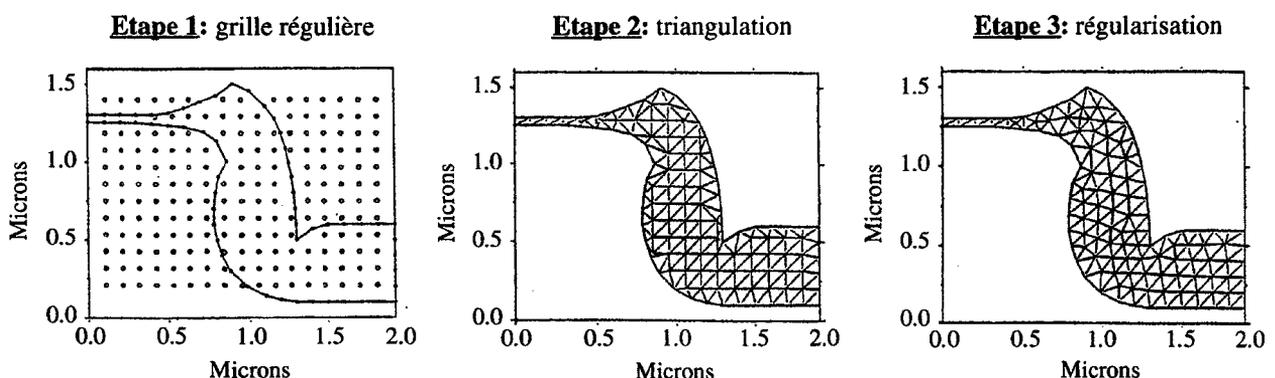


Figure II.22: Etapes permettant le maillage d'un domaine dans IMPACT-4.

II.4 Hypothèses pour les études bidimensionnelles

Aux chapitres §II.1 et §II.2, nous avons formulé les principes de la mécanique des matériaux ainsi que leurs équations constitutives dans le cas général tri-dimensionnel. Pour l'étude de nombreux problèmes, néanmoins, il est à la fois plus facile et plus pratique de réaliser une analyse 2D au moyen d'approximations appelées "*systemes plans*". Deux principales hypothèses sont employées dans ce cas, suivant la configuration géométrique de la structure perpendiculairement au plan de simulation: les déformations planes et les contraintes planes.

La figure II.23 illustre les principales configurations géométriques que nous étudions: les structures *in-situ* (i.e., motif donné d'un circuit complet) et les structures amincies afin de réaliser des caractérisations en transmission comme la Microscopie Electronique à Transmission (MET) ou la Diffraction Electronique par Faisceau Convergent (CBED).

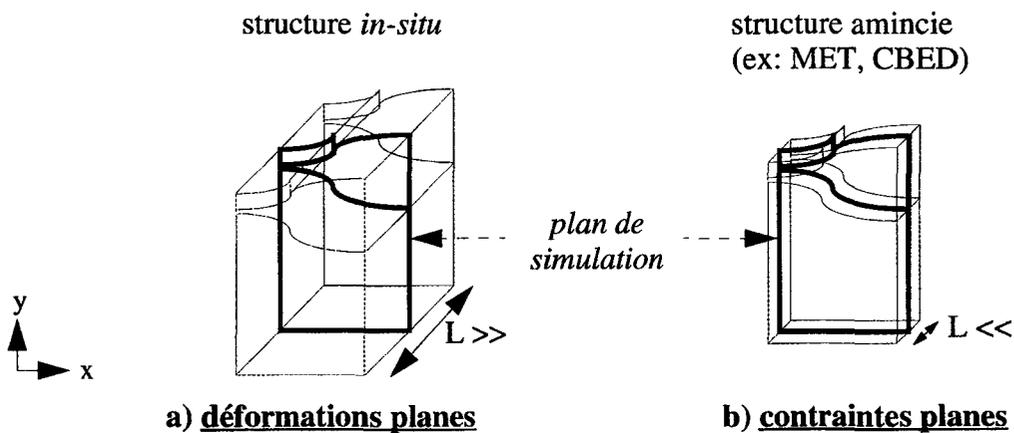


Figure II.23: Signification physique des hypothèses de déformations planes (a) et de contraintes planes (b).

Dans les deux problèmes, contraintes planes ou déformations planes, le champ de déplacements est défini uniquement par les déplacements u_x et u_y parallèles aux axes orthogonaux x et y d'un repère cartésien. De sorte que les seules composantes de contraintes et de déformations à prendre en compte sont les trois relatives au plan de simulation xOy (i.e.: σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{xy} , ϵ_{xx} , ϵ_{yy} et ϵ_{xy}).

II.4.1 Déformations planes

Par définition, l'hypothèse des déformations planes implique que toute déformation non-contenue dans le plan de simulation est nulle. D'un point de vue physique, une telle hypothèse signifie que la structure 2D est infiniment longue perpendiculairement au plan de simulation (figure II.23.a). Soit z l'axe perpendiculaire au plan de simulation xOy . Il en résulte que:

$$\epsilon_{zz} = \epsilon_{yz} = \epsilon_{zx} = 0 \quad (\text{II.48})$$

A partir de cette approximation, la loi de Hooke qui se simplifie et peut se mettre sous la forme (dans le cas d'un matériau isotrope):

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{Bmatrix} = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{bmatrix} 1 & \frac{\nu}{(1-\nu)} & 0 \\ \frac{\nu}{(1-\nu)} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1-2\nu)}{2(1-\nu)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{Bmatrix} \quad (\text{II.49})$$

Il est à noter que même si les déformations selon l'axe z sont toutes nulles, il existe une contrainte non-nulle σ_{zz} dans cette direction qui s'exprime en fonction des deux autres contraintes normales et du coefficient de Poisson du matériau:

$$\sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \quad (\text{II.50})$$

Naturellement, cette constatation reste vraie dans le cas d'un matériau anisotrope, les formules étant quelque peu plus complexes.

L'hypothèse des déformations planes correspond au cas couramment étudié d'un motif donné inclus dans un circuit de grande taille. Elle sera employée par défaut dans toutes nos analyses bidimensionnelles structurales avec IMPACT.

II.4.2 Contraintes planes

En contraintes planes, toutes les contraintes non-contenues dans le plan de simulation sont nulles et ne participent donc pas au travail intérieur. C'est typiquement la configuration d'une structure infiniment fine perpendiculairement au plan de simulation (figure II.23.b): c'est le cas notamment des motifs amincies pour réaliser des caractérisations fines de type TEM ou CBED. Cette hypothèse correspond aussi au cas d'un film mince, uniformément déposé sur un substrat, et dont la surface supérieure est libre.

L'approximation des contraintes planes impose que:

$$\sigma_{zz} = \sigma_{yz} = \sigma_{zx} = 0 \quad (\text{II.51})$$

L'équation régissant la loi de Hooke s'écrit alors (dans le cas d'un matériau isotrope):

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{xy} \end{Bmatrix} = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{(1-2\nu)}{2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{Bmatrix} \quad (\text{II.52})$$

Nous avons présenté dans ce chapitre les notions essentielles de mécanique des matériaux et de calcul de structures par éléments finis nécessaires au travail de modélisation des sources de contraintes. Mais avant d'aborder l'aspect modèle, nous allons passer en revue les principales sources de contraintes mécaniques en technologie silicium ainsi que les techniques pour les mesurer.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES DU CHAPITRE II

- [1] S. TIMOSHENKO et J.N. GOODIER, *Theory of Elasticity*, 3rd Ed., McGraw-Hill Ed., 1970.
- [2] A. RODRIGUEZ-FERRAN et A. HUERTA, *Comparing Two Algorithms to Add Large Strains to a Small Strain Finite Element Code*, J. Eng. Mech. (à paraître).
- [3] A. RODRIGUEZ-FERRAN, P. PEGON et A. HUERTA, *Two Stress Update Algorithms for Large Strains: Accuracy Analysis and Numerical Implementation*, Int. J. Num. Meth. Eng., **40**, pp. 4363-4404, 1997.
- [4] M. REINER, *Rhéologie Théorique*, Ed. Dunod, 1955.
- [5] B. PERSOZ, *La Rhéologie*, Ed. Masson et C^{ie}, 1969.
- [6] J.J. WORTMAN et R.A. EVANS, *Young's Modulus, Shear Modulus, Poisson's Ratio in Silicon and Germanium*, J. Appl. Phys., **36**, pp. 153-156, 1965.
- [7] W.A. BRANTLEY, *Calculated Elastic Constants for Stress Problems Associated with Semiconductor Devices*, J. Appl. Phys., **44**, pp. 534-535, 1973.
- [8] *Properties of Silicon*, INSPEC, Ed. The Gresham Press, Surrey, England, 1988.
- [9] N. BEAUMONT, J.M. DIANI et L. PENAZZI, *Introduction au Comportement des Matériaux et à sa Modélisation*, Ed. ENSTA, 1992.
- [10] D.S. GARDNER, H.P. LONGWORTH et P.A. FLINN, *Detection of Reactions and Changes in Thin Film Morphology using Stress Measurements*, J. Vac. Sci. Technol. A, **10**, pp. 1426-1441, 1992.
- [11] P.A. FLINN, D.S. GARDNER et W.D. NIX, *Measurement and Interpretation of Stress in Aluminum-based Metallization as a Function of Thermal History*, IEEE Trans. Electron Dev., **34**, pp. 689-698, 1987.
- [12] H. RUEDA, *Modeling of Mechanical Stress in Silicon Isolation Technology and its Influence on Device Characteristics*, Thèse de Doctorat, Univ. of Florida, 1999.
- [13] C.S. RAFFERTY, L. BORUCKI et R.W. DUTTON, *Plastic Flow During Thermal Oxidation of Silicon*, Appl. Phys. Lett., **54**(16), pp. 1516-1518, 1989.
- [14] G. HETERINGTHON, *The Viscosity of Vitreous Silica*, Physics and Chemistry of Glasses, **5**, p. 130, 1964.
- [15] J.H. LI et D.R. UHLMANN, *The Flow of Glass at High Stress Levels*, J. Non-Cryst. Solids, **3**, p. 127, 1970.
- [16] H. EYRING, *Viscosity, Plasticity and Diffusion as Examples of Absolute Reaction Rates*, J. Chem. Phys., **4**, p. 283, 1936.
- [17] P.P. DONNADIEU, O. JAOUËL et M. KLÉMAN, *Plasticité de la Silice Amorphe de part et d'autre de la Transition Vitreuse*, Phil. Mag. A, **52**, p. 5, 1985.
- [18] T. HARA, T. OKUDA, S. NAGANO et T. UEDA, *Stress Measurement in Al-Si-Cu Intercon-*

- nection Layers*, J. Electrochem. Soc., **142**, pp. 1946-1950, 1995.
- [19] M.D. THOULESS, J. GUPTA et J.M.E. HARPER, *Stress Development and Relaxation in Copper Films During Thermal Cycling*, J. Mater. Res., **8**, pp. 1845-1852, 1993.
- [20] Solidis-ISE, *ISE TCAD Release 6.0: User's guide*, 1999.
- [21] ANSYS, Release 5.5, SAS, 1998.
- [22] J. LEMAITRE et J.-L. CHABOCHE, *Mécanique des Matériaux Solides*, Ed. Dunod, 1985.
- [23] M.A. MOSKE, P.S. HO, D.J. MIKALSEN et J.J. CUOMO, *Measurement of Thermal Stress and Stress Relaxation in Confined Metal Lines. II. Stress Relaxation Study*, J. Appl. Phys., **74**(3), pp. 1725-1730, 1993.
- [24] M.A. KORHONEN, C.A. PASZKIET et C.Y. LI, *Mechanisms of Thermal Stress Relaxation and Stress-Induced Voiding in Narrow Aluminum-Based Metallizations*, J. Appl. Phys., **69**(12), pp. 8083-8091, 1991.
- [25] P. LEDUC, *Etudes des Contraintes Mécaniques dans les Edifices d'Interconnexions d'un Procédé Submicronique*, Thèse de doctorat, USTL, 1999.
- [26] O.C. ZIENKIEWICZ et I.C. CORMEAU, *Visco-Plasticity - Plasticity and Creep in Elastic Solids - A Unified Numerical Solution Approach*, Int. J. Num. Meth. Eng., **8**, pp. 821-845, 1974.
- [27] O.C. ZIENKIEWICZ, *La Méthode des Eléments Finis*, Ed. Ediscience, 1973.
- [28] G. DHATT et G. TOUZOT, *Une Présentation de la Méthode des Eléments Finis*, 2nd ed., Maloine S.A. Editeur, Paris, 1979.
- [29] A. POMP, S. ZELENKA, N. STRECKER et W. FICHTNER, *Viscoelastic Material Behavior: Models and Discretization used in DIOS-ISE*, IIS Technical Report No. 99/15, 1999.
- [30] K. GARIKIPATI, V.S. RAO, M.Y. HAO, E. IBOK et I. DEWOLF, *Modelling and Validation of Contributions to Stress in the Shallow Trench Isolation Process Sequence*, Comp. Model. Sim. Eng., **1**, 2000.
- [31] A.O. CIFUENTES et S.R. STIFFLER, *Modeling Thermal Stresses in Periodic Structures: Some Observations Regarding the Boundary Conditions*, J. Electron. Packaging, **114**, pp. 397-402 (1992).
- [32] L. BORUCKI, H.H. HANSEN et K. VARAHRAMIAN, *FEDSS: a 2D Semiconductor Fabrication Process Simulator*, IBM Journ. of Res. and Develop., **29**, p. 263, 1985.
- [33] M.E. LAW, C.S. RAFFERTY, R.W. DUTTON, *SUPREM IV User's Manual*, Stanford University, Stanford, 1986.
- [34] F. HERMELINE, *Triangulation Automatique d'un Polyèdre en Dimension N*, R.A.I.R.O. Analyse numérique, **16**(3), pp. 211-242, 1982.
- [35] S. BOZEK, *Génération de Maillage Automatique pour la Simulation Tridimensionnelle de Procédés de Fabrication de Circuits Intégrés*, Thèse de doctorat, USTL, 2000.

- [36] **MAGIC_FEAT**: Meshes and Global Integration for Semiconductor Front-End Simulation, projet européen IST-1999-11433.
- [37] **B. BACCUS, D. COLLARD, P. FERREIRA, T. HOFFMANN, E. LAMPIN, V. SENEZ et E. VANDENBOSSCHE**, *IMPACT 4.9: User's guide*, 1998.
- [38] **F. HECHT et A. MAROCCO**, *Internal Report on MSHPTS*, INRIA, Rocquencourt, France, 1986.

Chapitre III : SOURCES DE CONTRAINTES ET TECHNIQUES DE MESURE

La réalisation des composants intégrés sur silicium fait appel à un nombre toujours croissant d'étapes technologiques élémentaires, mettant en œuvre une grande variété de matériaux aux propriétés mécaniques différentes: dépôts et gravures de films minces, recuits de stabilisation (densification, cristallisation), croissance de matériaux par réaction avec le silicium (oxydation, siliciuration). Chacune de ces étapes engendre, dans une plus ou moins grande mesure, des contraintes mécaniques dans l'ensemble du dispositif.

Dans ce chapitre, on passe en revue les principales sources de contraintes, ainsi que les techniques de mesures les plus couramment utilisées pour les quantifier. Parmi ces techniques, nous attachons une importance toute particulière à la description de la spectroscopie micro-Raman qui est la technique privilégiée pour calibrer nos modèles numériques.

III.1 Origines des contraintes mécaniques en microélectronique

La complexité croissante des procédés technologiques de fabrication des circuits intégrés sur silicium se traduit par un nombre important d'étapes élémentaires (ex: épitaxies, dépôts, gravures, oxydations, recuits thermiques), et par l'utilisation de nombreux matériaux aux propriétés mécaniques parfois très différentes (ex: oxydes, nitrures, métaux). Ces deux tendances sont à l'origine des problèmes de fiabilité mécanique de plus en plus aigus rencontrés dans les unités de production. En effet, chaque étape supplémentaire d'un procédé est potentiellement source de contrainte mécanique pour l'ensemble du circuit. Il devient donc impératif de comprendre la nature et les origines de ces contraintes. Hu a réalisé une excellente synthèse de ces origines dans un article de référence [1]. Pour ce travail, nous avons choisi de classer les différentes sources de contrainte en 5 catégories: thermique, topographique, intrinsèque, extrinsèque, et de dopage.

III.1.1 Contraintes thermiques

L'intégration de structures élémentaires sur substrat de silicium se traduit généralement par le dépôt de plusieurs films minces, composés de matériaux ayant des coefficients de dilatation thermique (α) très différents. Le coefficient de dilatation thermique d'un matériau permet de quantifier sa déformation ε_{th} en réponse à une variation de température ΔT :

$$\varepsilon_{th} = \alpha \cdot \Delta T \quad (III.1)$$

Le coefficient de dilatation thermique α est une caractéristique intrinsèque du matériau. Il dépend de sa nature isotrope ou non, éventuellement de son orientation cristalline, et il peut être également fonction de la température. Le tableau III.1 donne un aperçu de la dispersion des valeurs répertoriées de ce coefficient pour les principaux matériaux utilisés en technologie silicium. Ce coefficient montre peu ou pas de dépendance en température. En microélectronique, elle est d'ailleurs presque systématiquement négligée dans les études structurales. Cette approximation semble assez réductrice dans le cas de certains matériaux cristallins ou polycristallins, notamment pour le silicium. La figure III.1 donne l'évolution de son coefficient de dilatation thermique en fonction de la température [2,3]. L'extraction de ce coefficient est réalisée à partir de la mesure, par une méthode optique, de la déformation d'échantillons de silicium soumis à des variations thermiques. Pour faciliter la comparaison avec des modèles analytiques, nous considérons une simple dépendance linéaire de ce coefficient avec la température par ajustement sur les données expérimentales (figure III.1). Dans le cas du silicium polycristallin, Suzuki a mesuré des valeurs de ce coefficient comprises entre $2.3 \times 10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$ et $4.2 \times 10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$, dans la gamme de températures [100°C - 900°C] [4]. Ces valeurs sont très voisines de celles du silicium monocristallin et nous permettent de considérer la même variation en température pour les deux phases.

Tableau III.1: Coefficient de dilatation thermique de quelques matériaux en microélectronique.

Matériau	α [$10^{-6} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$]	références
silicium, polysilicium	[2.6 - 4.5]	[2,3]
SiO ₂ (CVD, thermique)	0.5	[6-13]
Si ₃ N ₄	2.8	[14]
W	4.6	[15]
TiW	4.5	[16]
TiSi ₂	12.5	[18]
WSi ₂	6.25	[18]
AlCu	$23.3 + 0.017 \times T [^\circ\text{C}]$	[5]
Cu	16.6	[17]
SOG	[0.5 - 1.7]	[14,16]
HSQ (faible ε)	20.5	[22]

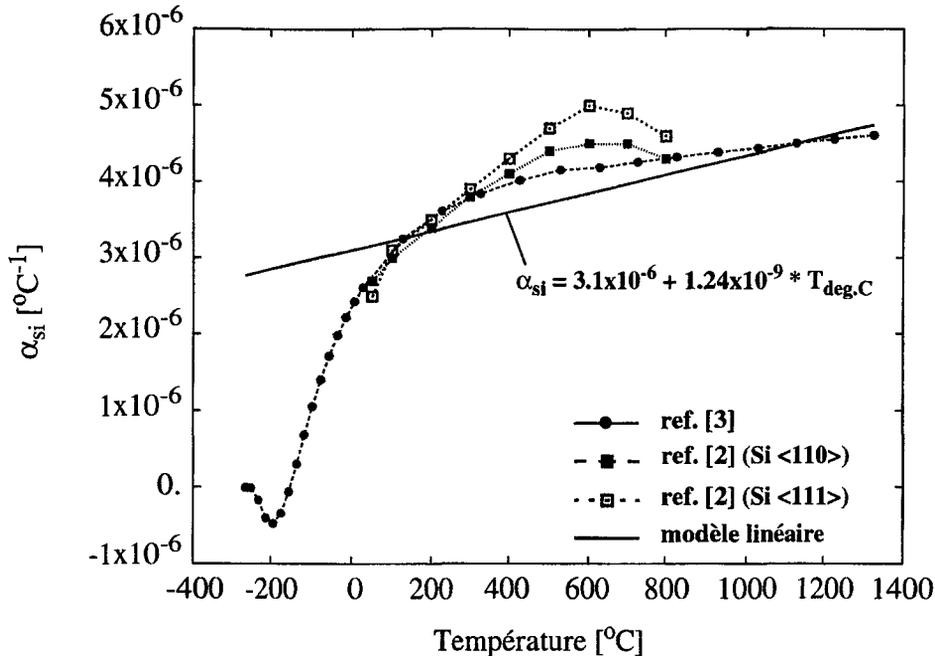


Figure III.1: Evolution du coefficient de dilatation thermique du silicium en fonction de la température [2,3].

Une dépendance significative, linéaire en température, a également été observée pour le coefficient de dilatation thermique des alliages d'aluminium [5].

En ce qui concerne le coefficient de dilatation thermique des oxydes de silicium, de nombreux auteurs proposent dans la littérature des valeurs proches $0.5 \times 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ [6,7], la dépendance en température étant de second ordre [8]. En conséquence, ce coefficient est souvent considéré constant, aussi bien pour les oxydes thermiques que ceux déposés par des méthodes CVD (*Chemical Vapor Deposition*): à basse pression LPVCD (*Low Pressure CVD*) ou à pression atmosphérique APCVD (*Atmospheric Pressure CVD*) [9], assistés par plasma PECVD (*Plasma Enhanced CVD*) [10,11], ou bien encore pour des oxydes formés à partir de composés TEOS (*Tetraethylorthosilicate*) [12]. Cette valeur est aussi utilisée pour les oxydes dopés en bore et/ou phosphore BPSG (*Borophosphosilicate Glass*) [13].

Par ailleurs, la complexité croissante des topographies des structures d'interconnexions se traduit par une plus grande difficulté à déposer les différentes couches diélectriques intermétalliques ILD (*Interlevel Dielectrics*). Pour faciliter la planarisation des topographies, les technologies avancées ont de plus en plus recours à des processus de dépôt par pelliculage d'oxyde à l'état liquide, comme le SOG (*Spin-On-Glass*) ou les oxydes à faible permittivité ϵ et de type HSQ (*Hydrogen Silsesquioxane*) [19,20]. Des recuits à température modérée ($<500^\circ\text{C}$) suffisent généralement à densifier ces matériaux [21]. Néanmoins, leur fiabilité mécanique reste critique: les craquements de films couramment observés proviennent en partie d'une déformation excessive lors de variations thermiques, résultant de leur coefficient de dilatation thermique élevé.

Pour comprendre comment ces contraintes thermiques se développent, considérons un système unidimensionnel film-substrat (figure III.2) tel que l'épaisseur du film reste très

inférieure à celle du substrat. Cette hypothèse est en accord avec les caractéristiques des systèmes étudiés. Initialement, le système film-substrat est considéré en équilibre par rapport aux contraintes résiduelles. Ils sont donc dans un état mécaniquement "neutre" de référence dans lequel ils peuvent être considérés indifféremment comme assemblés ou séparés (figure III.2.a). Si l'on suppose que le film possède un coefficient de dilatation plus grand que celui du substrat, un changement de température (ex: refroidissement) provoquera une contraction relative du film par rapport au substrat (figure III.2.b).

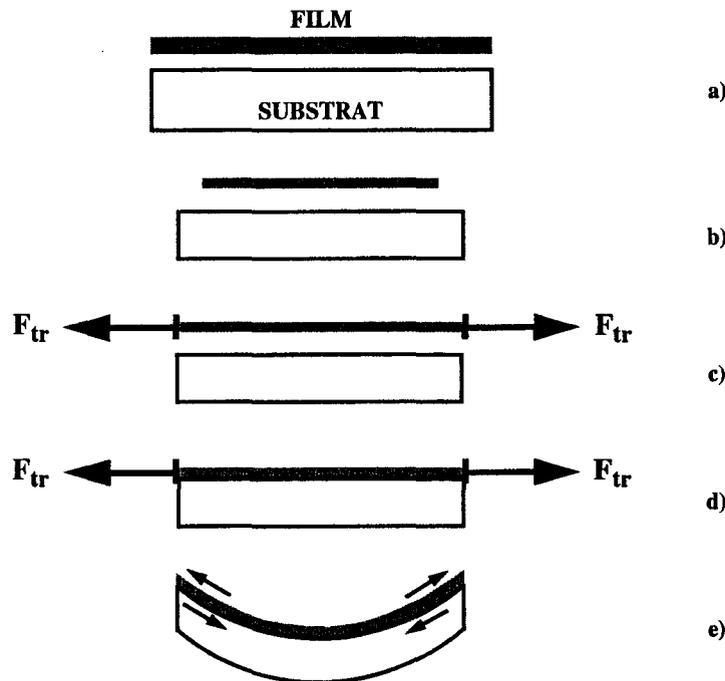


Figure III.2: Etablissement des contraintes thermiques dans le film: a) Film décollé du substrat; b) Contraction du film par rapport au substrat; c) Application de force de traction F_{tr} au bord du film; d) Rassemblement du film sur le substrat; e) Suppression des forces appliquées: courbure du système.

Néanmoins, les glissements d'interface étant le plus souvent négligeables, les dimensions du film et du substrat doivent rester identiques, au niveau de l'interface. Une force de traction fictive F_{tr} est alors appliquée de part et d'autre des extrémités du film afin qu'il atteigne à nouveau les dimensions du substrat (figure III.2.c), ce qui autorise le rassemblement (figure III.2.d). Une fois la force de traction supprimée, le film en tension a tendance à revenir à sa position initiale mais le substrat rigide l'en empêche. Par conséquent, le film est soumis à une déformation, et une contrainte en tension subsiste dans le plan du film, exercée désormais par le substrat lui-même qui subit une compression par réaction (figure III.2.e).

III.1.2 Contraintes intrinsèques

De nombreux types de films de surface sont utilisés pour quatre principales applications: le masquage, la passivation, l'isolation diélectrique, et la conduction électrique. Les contraintes mécaniques intrinsèques sont directement liées à la nature du matériau utilisé et à sa technique de fabrication. Elles se manifestent à chaque fois qu'un état de non-équilibre se crée lors du

dépôt d'un film. Il est intéressant de connaître leur amplitude ainsi que leur évolution à double titre:

- i) leurs dérives, mêmes faibles, indiquent une modification des paramètres de l'équipement,
- ii) des niveaux excessifs de contraintes peuvent provoquer non seulement des défauts de structure dans le film, comme un décollement ou une fissure, mais également dégrader la fiabilité des lignes conductrices.

Pour les oxydes déposés par CVD à basse pression (LPCVD) ou à pression atmosphérique (APCVD), la contrainte intrinsèque est généralement en tension (de quelques MPa jusqu'à environ 400MPa) [1]. L'origine de cette contrainte en tension est probablement liée au processus de formation de la couche où les molécules SiO_2 arrivent à la surface de façon aléatoire, les liaisons inter-moléculaires ne s'établissant que progressivement pendant le processus de croissance. Des observations similaires ont été faites pour le nitrure de silicium. Pour ce matériau, les contraintes en tension générées peuvent fréquemment atteindre des valeurs élevées, voisines de 1GPa.

Par contre, le bombardement ionique utilisé pour les dépôts de type PECVD augmentent la densité des films, que ce soient pour les oxydes ou pour les nitrures. Il en résulte le plus souvent une contrainte en compression.

Concernant les films de polysilicium, déposés également par des techniques CVD, la situation est encore plus complexe. Des expériences ont montré que des facteurs tels que le dopage ou la structure des grains affectent de manière significative la contrainte intrinsèque [23]. Par ailleurs, l'implantation ionique d'impuretés, après la phase de dépôt, a un effet compressif sur la couche [24]. Cette technique peut donc être employée pour compenser les contraintes intrinsèques en tension des films.

Toutes ces constatations mettent en évidence l'importance de la composante intrinsèque dans le champ de contraintes résiduelles. Stadtmüller a établi une synthèse qualitative entre les paramètres du processus de dépôt et la contrainte intrinsèque engendrée [9]. Ces principaux paramètres technologiques sont [25]:

- la température de dépôt,
- la pression,
- la puissance (i.e., bombardement ionique)
- les concentrations en agents chimiques réactifs,
- la vitesse de dépôt,
- la présence d'impuretés ioniques (bore, phosphore)
- la teneur en radicaux OH (ambiance humide),
- le type de réacteur.

Cette dépendance de la contrainte intrinsèque au procédé rend difficile sa modélisation. De ce fait, toute analyse structurale nécessite d'établir au préalable une base de données, à partir de la caractérisation des contraintes intrinsèques des différents films employés.

III.1.3 Contraintes extrinsèques

Les contraintes que l'on qualifie d'extrinsèques peuvent être d'origines variées puisqu'elles englobent l'ensemble des phénomènes que peut subir un film après dépôt. Leur définition est d'autant plus complexe que les changements structurels à l'origine de ces contraintes sont souvent propres à un matériau donné. Ainsi, certains films montrent une certaine propension à absorber ou évacuer les molécules d'eau, phénomène qui s'accompagne de changements de contraintes significatifs. C'est notamment le cas des oxydes à dopage élevé, comme les films de BPSG et de PSG [26,27], ou bien les oxydes intrinsèquement riches en radicaux OH après dépôt, comme par exemple les oxydes TEOS [28]. De plus, les procédés technologiques actuels ont de plus en plus recours à des recuits de densification pour stabiliser ces films. Ces recuits, effectués généralement à haute température, modifient de manière substantielle les propriétés mécaniques des matériaux et génèrent des contraintes en tension élevées [29]. De même, certains matériaux, tels que le polysilicium, au départ en phase amorphe, peuvent subir des phénomènes de cristallisation accompagnés d'une contraction de volume, ce qui donne naissance à des contraintes en tension [30].

Ainsi, 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 du film.

III.1.4 Contraintes liées aux dopages

De façon générale, des déformations localisées des mailles d'un matériau cristallin sont susceptibles de se produire lors de l'incorporation d'atomes de tailles différentes de celles des atomes du matériau hôte. C'est typiquement le cas lors de la réalisation de zones fortement dopées dans les substrats de silicium (ex: zones sources/drains des transistors MOS) ou lors d'une épitaxie dont la concentration est très différente de celle du substrat (ex: épitaxie en $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$ sur substrat de silicium). Il se crée alors des régions de structures cristallines identiques mais présentant des paramètres de maille différents. Le désaccord de périodicité de la maille doit nécessairement s'annuler à l'interface entre ces régions, par déformation élastique (i.e., courbure du substrat). Si le désaccord est trop important, des dislocations (*misfit dislocations*) apparaîtront pour relaxer ces déformations [31].

Concernant le désaccord de maille lié à l'épitaxie, le problème est tout à fait équivalent à celui bien connu des hétéroépitaxies (i.e., épitaxie d'un matériau différent du substrat).

III.1.5 Contraintes topographiques

Des contraintes sont également générées lors des étapes du procédé qui induisent des modifications significatives des topographies, comme par exemple les gravures de films ou les croissances de matériaux par consommation de silicium (i.e., cas des oxydations de champ et des siliciurations locales des contacts sources/drains).

III.1.5.1 Gravure de films

Des films continus induisent généralement peu de contraintes dans le substrat sous-jacent, car l'épaisseur du substrat demeure très grande par rapport à celle des films. La justification mathématique de cette affirmation est donnée en annexe, à la fin du manuscrit (équation (A.13)). La situation devient plus critique quand la topographie des films de surface n'est pas plane ou qu'elle contient des discontinuités (ex: ouvertures de masque). En ce qui concerne les étapes de gravure, ces discontinuités peuvent induire des pics de contraintes très élevés dans le substrat. Hu a montré expérimentalement que ces contraintes localisées induisent des boucles de dislocation, particulièrement dans les zones fragilisées par une sur-concentration de défauts ponctuels (lacunes et interstitiels), générée par implantation ionique [1]. Dans ce cas, les contraintes favorisent la nucléation des interstitiels en défauts étendus.

III.1.5.2 Croissance de matériaux

Les croissances de matériaux issues des étapes d'oxydation thermique ou de siliciuration sont connues pour engendrer des niveaux élevés de contraintes, en particulier aux bords des zones de croissance. Des mesures de contraintes par spectroscopie micro-Raman révèlent effectivement des pics de contraintes aux bords d'isolations de type LOCOS [32], et aux bords de siliciures de titane ou de cobalt [33].

Dans la pratique, l'oxydation thermique permet de former les isolations entre les zones actives des transistors. Pour protéger ces zones actives lors de la croissance de l'oxyde épais, on utilise un masque de nitrure. La photographie de la III.3 illustre une structure type d'isolation LOCOS. Durant la cinétique d'oxydation, un volume de silicium est transformé en 2.25 volumes d'oxyde de silicium, en l'absence de masque. Cette croissance se déroule dans les trois directions spatiales. Verticalement, elle se réalise librement alors que latéralement elle est retenue par la présence du substrat. Les contraintes sont donc particulièrement prononcées dans tous les matériaux aux transitions entre zones masquées et non masquées (i.e., bec d'oiseau). Les niveaux de contraintes générées par cette croissance seront calculées au chapitre V.

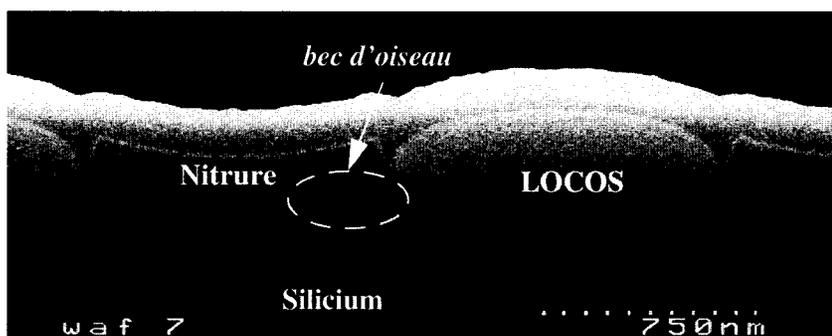


Figure III.3: Photographie MEB de structures d'isolation de type LOCOS [34].

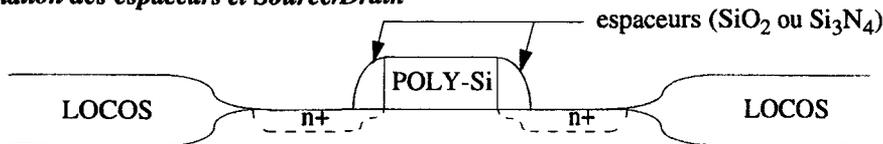
Les technologies actuelles utilisent une autre structure d'isolation: l'isolation par tranchée peu profonde STI (*Shallow Trench Isolation*) [35]. La différence fondamentale avec les structures LOCOS est que l'on grave initialement le substrat de silicium et que l'isolation est réalisée par remplissage de cette tranchée avec de l'oxyde. Si cette technique ne nécessite plus de longues étapes d'oxydation, il est nécessaire d'effectuer d'importants recuits pour stabiliser

par densification l'oxyde remplissant la tranchée, ce qui représente une source tout aussi importante de contraintes [36].

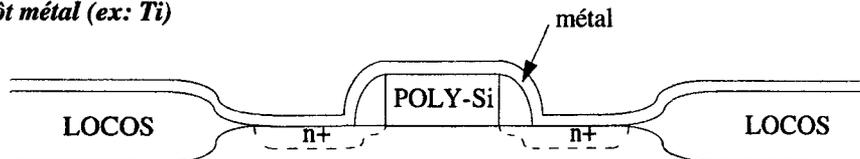
La formation des siliciures constitue une autre étape de croissance de matériau. Cette technique a pour principal objectif de contrebalancer l'augmentation des résistances de contact qui accompagne la réduction des dimensions. Afin de minimiser ces résistances, ainsi que les résistances d'interconnexions des lignes de polysilicium, une technique de siliciuration de type auto-aligné est couramment employée. Le principe de cette technique SALICIDE (self-aligned silicide) est illustré à la figure III.4.

Lorsqu'un métal de type "réfractaire" (ex: Pt, Co, Ti, W) est déposé directement sur le silicium (ou le polysilicium) et que le substrat subit un recuit thermique, le métal et le silicium réagissent pour former le siliciure. La conductivité de cette phase intermédiaire est typiquement supérieur de plusieurs ordres de grandeur à celle des zones fortement dopés n+ et p+.

a) Formation des espaceurs et Source/Drain



b) Dépôt métal (ex: Ti)



c) Recuit (RTP ou classique) + gravure selective du métal non consommé

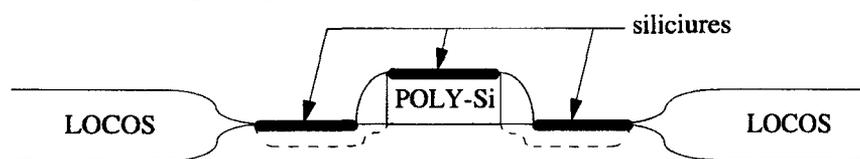


Figure III.4: Schématisation des étapes de fabrication de la technique SALICIDE [37].

Les contraintes mécaniques produites lors de la croissance des siliciures possèdent la même origine que celles liées aux oxydations et peuvent être très élevées. Elles ont plusieurs origines. Le coefficient de dilatation thermique des siliciures étant le plus souvent très supérieur à celui du silicium (ex: $\alpha[\text{TiSi}_2] = 12.5 \times 10^{-6} / ^\circ\text{C}$), les contraintes thermiques des films peuvent dépasser +1GPa en tension. Par ailleurs, les contraintes locales engendrées aux bords des siliciures sont du même ordre de grandeur [33].

III.2 Techniques de mesure des contraintes et des propriétés mécaniques

La calibration des modèles des différentes sources de contraintes présentées se base sur des mesures de contraintes, mais également sur la connaissance des propriétés mécaniques des matériaux utilisés. Nous présentons les deux types de caractérisation.

III.2.1 Synthèse des techniques d'extraction des propriétés mécaniques

Pour une étude structurale de type éléments-finis, la connaissance des constantes d'élasticité (module d'Young, coefficient de Poisson) constitue le base de données essentielle, à définir avec précision avant toute analyse. Les deux techniques de caractérisation les plus utilisées pour extraire ces paramètres sont la nanoindentation et la spectroscopie Brillouin.

La principe de la nanoindentation consiste en l'application d'une pointe en diamant sur la surface d'un échantillon. La relation entre la réponse appliquée et l'enfoncement de la pointe permet d'extraire les propriétés mécaniques du matériau [38].

La spectroscopie Brillouin repose sur le traitement des phonons acoustiques émis par l'ondulation de la surface d'un échantillon soumis à une excitation lumineuse [39].

Tableau III.2: Propriétés mécaniques des principaux matériaux utilisés en microélectronique.

Matériau	E [GPa]	ν	E/(1- ν) [GPa]	références
substrat:				
silicium [100]	131	} 0.064 - 0.279	-	[40]
[110]	169			
[111]	187			
isolants, passivations:				
SiO ₂ thermique	66	0.17	79	[50]
LPCVD	-	-	40 - 103	[51]
PECVD	60	0.25	80	[14]
APCVD	56	0.21	71	[14]
Si ₃ N ₄ LPCVD	-	-	370	[43]
PECVD	143	0.28	199	[14]
SOG	14	0.25	19	[42]
HSQ (faible ϵ)	-	-	7.1	[44]
barrières de diffusion, contacts:				
Ti	115	0.34	170	[41,17]
W	410	0.29	578	[46,47]
siliciures:				
TiSi ₂	264	0.22	339	[48,49]
CoSi ₂	-	-	145	[48]
lignes métalliques:				
AlCu, AlSiCu	69.7 - 0.037xT	0.33	100 - 114	[17,45,5]
Cu	62	0.34	94	[41]

(NB: T est la température en °C)

Les valeurs extraites de la littérature des principaux matériaux utilisés en microélectronique sont donnés au tableau III.1 (certaines techniques ne donnent accès qu'au module biaxial $E/(1-\nu)$). A noter que dans le cas du silicium, l'extraction d'un module d'Young et d'un coefficient de Poisson n'a de sens que si on le considère comme isotrope. Cette approximation demeure acceptable au premier ordre.

Par ailleurs, la plupart de ces propriétés mécaniques présentent, à des degrés divers, des variations en température. Hormis le cas des alliages d'aluminium, ces dépendances sont souvent minimes et, pour simplifier la compréhension des mécanismes physiques, nous les négligerons par la suite.

III.2.2 Synthèse des techniques actuelles de mesure de contraintes

Il existe différentes méthodes permettant de mesurer l'amplitude des contraintes en technologie silicium. Elles sont basées soit sur la mesure d'une déformation de la maille cristalline (Rayons X, CBED, micro-Raman), soit sur la mesure du rayon de courbure macroscopique de la plaque (déflexion de plaque). On rappelle les avantages et les inconvénients de chaque méthode.

III.2.2.1 Déflexion de plaque

Cette méthode expérimentale, connue aussi sous le nom de "méthode de la flèche", est couramment utilisée en milieu industriel car elle est facile d'application, rapide, non destructive et valable aussi bien pour les matériaux amorphes que cristallins. Elle s'appuie sur l'équation de Stoney [52], et consiste à mesurer la courbure du système (film+substrat) avant et après dépôt du film. Les détails de calcul sont reportés en annexe. On aboutit au final à la formulation suivante, permettant de calculer la contrainte résiduelle moyenne σ_f d'un film mince déposé uniformément sur un substrat:

$$\sigma_f = \frac{1}{6} \frac{E_s}{(1-\nu_s)} \frac{t_s^2}{t_f} \cdot \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{R_0} \right) \quad (\text{III.2})$$

où E_s et ν_s représentent le module d'Young et le coefficient de Poisson du substrat, respectivement; t_s et t_f sont les épaisseurs du substrat et du film; et $(1/R - 1/R_0)$ correspond au changement relatif de courbure du système. Les substrats vierges ayant toujours une légère courbure initiale, le terme correctif $1/R_0$ permet, entre autres, de prendre en compte cette imperfection.

Par un traitement mathématique approprié et sous certaines conditions, elle s'étend aussi à la détermination des contraintes pour des motifs géométriques disposés en réseaux [53]. Certaines hypothèses d'application doivent cependant être vérifiées, et notamment:

- i) l'épaisseur du film doit être négligeable par rapport à celle du substrat,
- ii) le substrat de silicium possède un comportement élastique,
- iii) l'état de contraintes est homogène dans le film.

L'appareillage de mesure pour cette technique est illustré à la figure III.5. Le laser, le miroir et le détecteur sont solidaires les uns des autres et se déplacent grâce à un moteur pas à

pas. Le faisceau laser est dirigé sur la surface du substrat et balaye une distance correspondant à son diamètre. A chaque position correspond un angle de réflexion 2β . Le rayon réfléchi est dirigé sur un détecteur sensible à la position qui le traduit en une tension électrique. L'appareil étalonné établit la correspondance entre la tension mesurée et la courbure associée.

Une des fonctionnalités très intéressante que possèdent certains appareils commerciaux de ce type, est de permettre la mesure en température. Typiquement, ces appareils permettent des mesures jusqu'à 500°C , mais les plus performants peuvent aller jusqu'à 800°C .

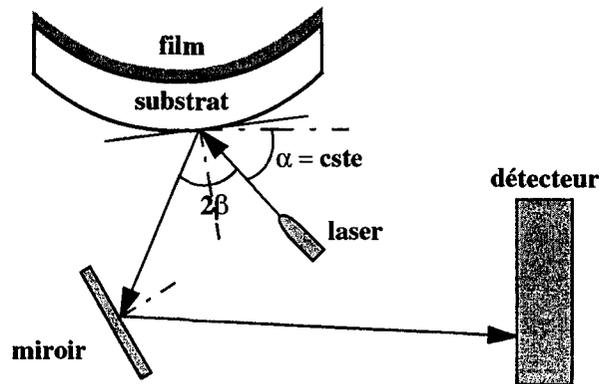


Figure III.5: Principe de la technique de mesure par déflexion de plaques.

Notons enfin que la technique de mesure par déflexion de plaques peut être appliquée au cas de dépôts multiples de films minces. Si on considère un empilement de n films de contraintes moyennes σ_i et d'épaisseurs t_i , on peut montrer que toutes les forces F_i par unité de longueur ($\sigma_i t_i$) contribuent à la courbure $1/R$ de l'ensemble (substrat+films) [54]:

$$\frac{1}{R} = \sum_{i=1}^n (\sigma_i t_i) \cdot \left[\frac{1}{6} \frac{E_s}{(1-\nu_s)} t_s^2 \right]^{-1} \quad (\text{III.3})$$

En utilisant l'équation de Stoney (équation (III.3)), on peut obtenir la contrainte moyenne de l'empilement σ_f :

$$\sigma_f = \left(\sum_{i=1}^n \sigma_i t_i \right) / \left(\sum_{i=1}^n t_i \right) \quad (\text{III.4})$$

Il est ainsi possible de déterminer la contrainte d'un film quelconque de l'empilement si les contraintes de tous les autres films sont connues. Des mesures ont validé cette démarche [54].

III.2.2.2 CBED

La Diffraction Electronique par Faisceaux Convergeants (CBED) est la technique de diffraction par Microscopie Electronique à Transmission (TEM) la plus ancienne [55,56]. Son originalité se situe dans l'utilisation d'un rayon convergent, permettant d'analyser des structures ou des défauts cristallins de diamètre bien inférieur à $0.1\mu\text{m}$. Depuis 1977, le CBED a étendu le spectre d'informations structurales que l'on peut obtenir par analyse TEM, grâce à une sensibilité (en déformation) de 10^{-4} - 10^{-3} [57]. De plus, cette technique est à l'heure actuelle

celle qui présente le plus grand potentiel en terme de résolution. C'est la raison pour laquelle d'importants efforts de recherche sont actuellement menés, notamment dans le projet STREAM, pour améliorer cette technique et porter sa résolution en-dessous de 10nm, résolution nécessaire à l'étude des procédés actuellement en production (technologie à 0.18 μ m et moins).

Le principe de la technique repose sur l'utilisation d'un faisceau d'électrons, convergent et étroit (entre 10nm et 100nm de diamètre), qui est diffracté au travers d'un échantillon aminci (épaisseur de quelques milliers d'Angströms). La procédure de préparation de l'échantillon est identique à celle utilisée pour le TEM (collage, sciage, ponçage mécanique, gravure par faisceau d'ions jusqu'à perforation).

Le faisceau d'électrons incident arrive sur les plans réticulaires du matériau en faisant un angle θ par rapport à la normale au plan. Il est alors diffracté par les plans réticulaires et arrive au niveau du plan focal, avec une certaine orientation, laissant la trace d'un point ou d'un disque lumineux. Pour chacun d'entre eux, les indices hkl du plan réticulaire de diffraction peuvent être attribués. L'ensemble de ces points lumineux constitue la figure de diffraction (ou figure CBED).

Les variations de ces distances inter-réticulaires sont extraites à partir de la comparaison des figures de diffraction du silicium contraint étudié avec celle d'un silicium non-contraint. Des résultats typiques de figures de diffraction obtenues par CBED sont représentés à la figure III.6. Les lignes constituant ces figures se déplacent très facilement en présence de déformations dans le matériau. C'est cette propriété qui est utilisée pour mesurer les déformations et en déduire les contraintes correspondantes. L'intérêt de cette technique de mesure est qu'elle permet d'extraire avec une grande précision le tenseur complet des déformations [59]. Mais deux inconvénients majeures limitent l'utilisation plus systématique de cette technique:

- i) elle n'est valable que pour des matériaux cristallins, ou sous certaines conditions aux matériaux polycristallins;
- ii) la préparation des échantillons, identique à celle utilisée pour le TEM, reste très longue et fastidieuse.

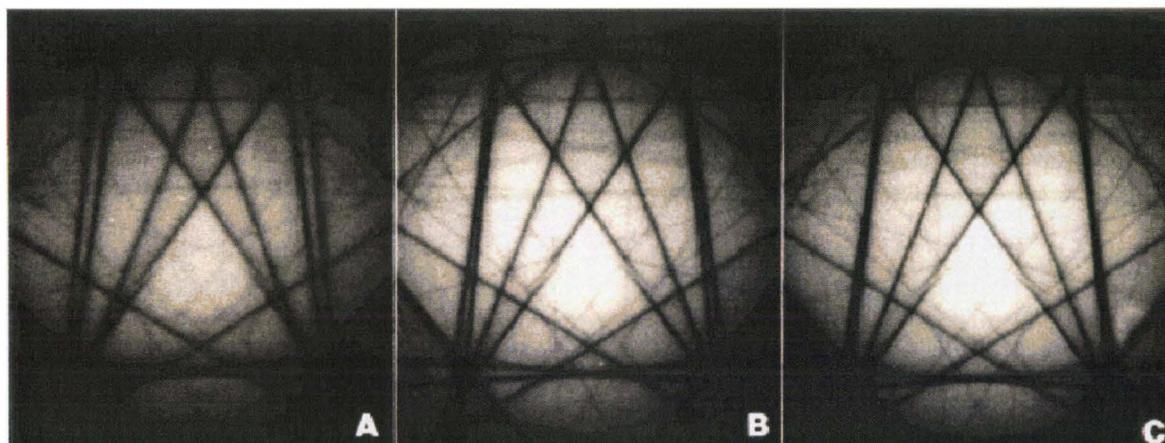


Figure III.6: Figures de diffraction CBED pour un échantillon en tension (A), neutre (B), et en compression (C).

De plus, une question reste en suspens quant à l'effet induit par la préparation de l'échantillon sur la mesure. En effet, à cause de l'amincissement de l'échantillon, un relâchement des tensions le long de la direction de l'amincissement peut avoir lieu. La conséquence peut être une modification du champ de déformations par rapport à l'échantillon massif. Certains auteurs pensent néanmoins qu'il s'agit là d'un effet de second ordre [58].

III.2.2.3 Rayons X

Tout comme la méthode CBED, la diffraction des rayons X n'est applicable que dans le cas des matériaux cristallins. Cette méthode prend comme jauge de déformation la distance inter-réticulaire des plans d_{hkl} d'une famille de plans cristallins du film. Cette distance d_{hkl} est modifiée en présence de contraintes résiduelles et est mesurable par diffraction de rayons X grâce à la loi de Bragg:

$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda \quad (\text{III.5})$$

où λ est la longueur d'onde des rayons X incidents, θ est l'angle de Bragg et d_{hkl} la distance inter-réticulaire des plans définis par les indices de Miller (h, k et l). La position de la source étant fixe, une modification de la distance inter-réticulaire d_{hkl} modifie l'angle de Bragg comme cela est illustré à la figure III.7.

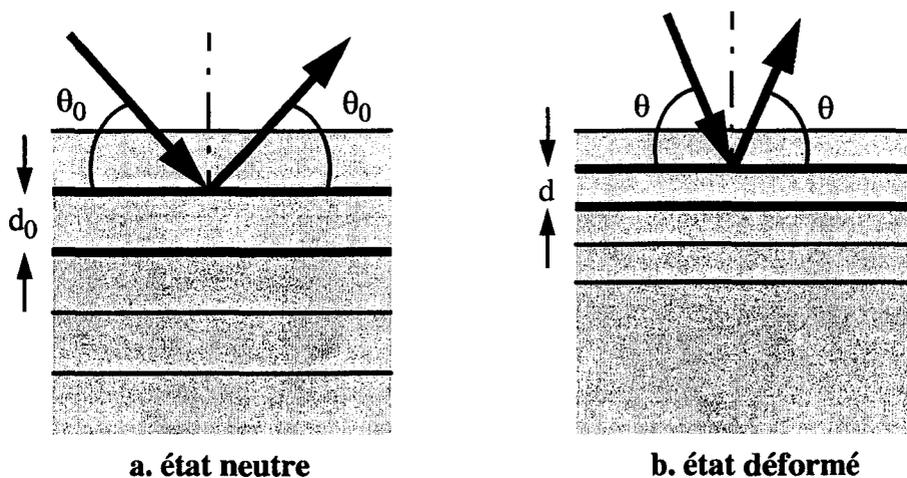


Figure III.7: Principe de la mesure des déformations par la diffraction des rayons X: variation de l'angle d'incidence et de la distance inter-réticulaire pour un matériau à l'état neutre (a) et déformé (b).

A une variation de la distance inter-réticulaire Δd , sous l'effet d'une contrainte, est associée une déformation résultante ε :

$$\varepsilon = \frac{\Delta d}{d_0} = \frac{d - d_0}{d_0} \quad (\text{III.6})$$

En remplaçant d par l'expression de la loi de Bragg, on obtient:

$$\varepsilon = \frac{\sin \theta_0}{\sin \theta} - 1 \quad (\text{III.7})$$

Cette dernière équation montre que la mesure de la déformation est reliée à la détermination du déplacement $\Delta\theta$ du pic de Bragg, par rapport à l'angle initial θ_0 . La précision de la mesure est d'autant plus importante que les angles de Bragg sont grands. Du fait de la faible profondeur de pénétration des rayons X dans les matériaux, les contraintes résiduelles sont mesurées à la surface dans le cas de pièces massives [60]. Pour les films minces sur substrat épais, la pénétration peut être supérieure ou égale à l'épaisseur des films. La résolution typique de cette technique de mesure est d'environ 100nm [61], ce qui est acceptable pour caractériser des films métalliques par exemple, mais demeure insuffisant pour mesurer les déformations locales du silicium pour les motifs élémentaires des technologies à venir.

Par ailleurs, il est possible d'extraire par rayons X les différentes composantes des tenseurs de déformations et de contraintes: on utilise pour cela la méthode dite du " $\sin^2\psi$ ", qui permet de déterminer les contraintes σ_{xx} et σ_{yy} dans le plan du film. Elle est fondée sur la mesure des angles de Bragg pour différentes inclinaisons et dans différentes orientations azimutales, autour du point de mesure [62,63].

Il existe d'autres techniques de mesure de contraintes, parmi lesquelles techniques on peut citer la "méthode du ballon" [50] qui permet une mesure moyenne de la contrainte des films ou la technique très récemment mise au point de mesure locale à l'échelle nanométrique [64]. Les premiers résultats de cette seconde méthode semblent prometteurs, mais de plus amples validations sur différentes structures sont nécessaires.

Nous détaillons à présent le principe de la spectroscopie micro-Raman ainsi que le modèle associé.

III.3 Spectroscopie micro-Raman

III.3.1 Technique expérimentale

La spectroscopie micro-Raman est, à l'heure actuelle, l'une des techniques de mesure de contraintes locales les plus performantes. Cette technique, initialement mise au point pour réaliser des analyses cristallographiques ou de composition chimique, est de plus en plus couramment utilisée comme une jauge de contraintes mécaniques. Le principe de la mesure repose sur la mesure des déviations des fréquences Raman des phonons optiques du cristal. La figure III.8.a illustre le protocole expérimental employé.

Un faisceau laser, généralement d'Argon (Ar^+ -ion), est projeté à la surface d'un échantillon. Si le faisceau réfléchi est issu d'une surface non-contrainte, la fréquence pic ω_0 du spectre Raman des phonons du silicium est de 520 cm^{-1} . Un exemple de spectre Raman est illustré à la figure III.8.b, où l'on distingue clairement le pic principal à 520 cm^{-1} , ainsi que les pics secondaires dus au laser d'Argon. Si la zone de réflexion du faisceau est contrainte, la fréquence des phonons est modifiée. Cela se traduit par une déviation $\Delta\omega$ du pic du spectre Raman. L'amplitude et le signe de cette déviation donnent une mesure de la contrainte: une déviation positive (resp. négative) indique une zone de compression (resp. tension). Les

spectromètres Raman du commerce ont une précision de l'ordre de 0.05 cm^{-1} , ce qui correspond à une résolution en contrainte d'environ 25 MPa, dans l'hypothèse d'une contrainte uniaxiale [66].

Dans la pratique, la déviation $\Delta\omega$ du pic est extraite en ajustant une distribution de type lorentzienne sur le spectre mesurée. En effet, il est prouvé que c'est ce type de distribution qui est le plus juste pour reproduire le spectre Raman du silicium (la largeur à mi-hauteur de la lorentzienne est typiquement de $A \approx 1.4 \text{ cm}^{-1}$) [65].

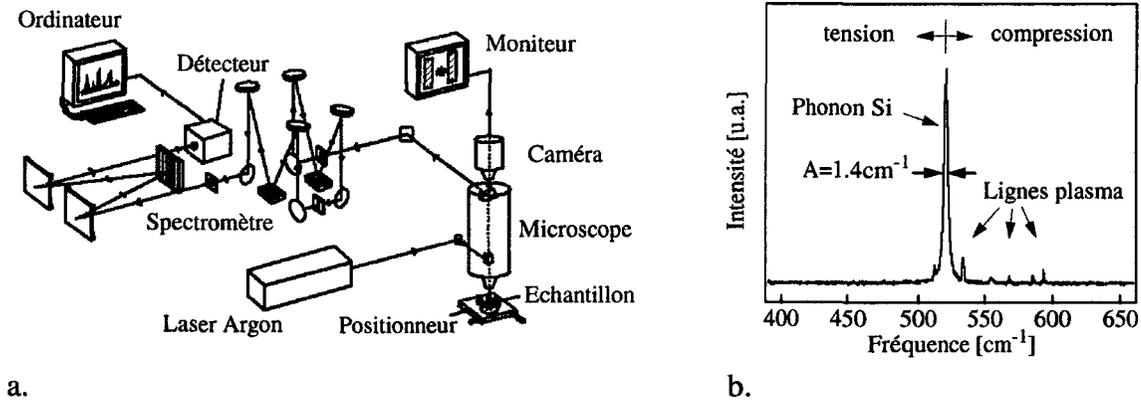


Figure III.8: Protocole expérimental de la mesure micro-Raman (a); spectre Raman du silicium non contraint (b).

III.3.2 Théorie

Dans un semiconducteur de structure cristalline diamant comme le silicium, il existe trois modes Raman actifs définissant trois phonons optiques. De part la symétrie cubique du silicium non-contraint, ces trois phonons sont dégénérés en fréquence à $\mathbf{k}=0$. Une déformation du cristal non-hydrostatique lève alors cette dégénérescence en détruisant cette symétrie.

L'une des premières études concernant l'effet des contraintes sur les modes Raman a été réalisée par Ganesan [67]. Il démontra que les fréquences des trois phonons optiques en présence de déformations correspondent, à $\mathbf{k}=0$, aux valeurs propres du tenseur des potentiels de déformation \mathbf{K} . Les coefficients K_{lm} de ce tenseur sont obtenus par développement en puissance des déformations:

$$K_{lm} = K_{lm}^{(0)} + \sum_{i,j=1}^3 K_{ijlm}^{(\epsilon)} \epsilon_{ij}, \quad \text{avec } K_{lm}^{(0)} = \omega_0^2 \delta_{lm} \quad (\text{III.8})$$

où ω_0 est la fréquence Raman du cristal non-contraint, ϵ représente le tenseur des déformations, et δ_{lm} est le delta de Kronecker.

De manière analogue à l'élasticité anisotrope, le silicium ayant une structure cristallographique de type diamant, le tenseur $\mathbf{K}^{(\epsilon)}$ est symétrique et n'est défini que par trois coefficients indépendants. En utilisant la notation condensée de Voigt, ce tenseur s'écrit:

$$[\mathbf{K}^{(\varepsilon)}] = \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} & K_{12} & 0 & 0 & 0 \\ K_{12} & K_{11} & K_{12} & 0 & 0 & 0 \\ K_{12} & K_{12} & K_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & K_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & K_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & K_{44} \end{bmatrix} \quad (\text{III.9})$$

Les coefficients définissant ce tenseur des potentiels de déformation ont été déterminés expérimentalement [68]:

$$\begin{aligned} K_{11} &= -1.85 \cdot \omega_0^2 \\ K_{12} &= -2.31 \cdot \omega_0^2 \\ K_{44} &= -0.71 \cdot \omega_0^2 \end{aligned} \quad (\text{III.10})$$

La recherche des fréquences Raman passe par la résolution d'un système aux valeurs propres, défini par l'équation (III.8). Dans la littérature, on parle également de résolution de "l'équation séculaire":

$$\begin{vmatrix} K_{11}\varepsilon_{11} + K_{12}(\varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) - \lambda & 2K_{44}\varepsilon_{12} & 2K_{44}\varepsilon_{13} \\ 2K_{44}\varepsilon_{12} & K_{11}\varepsilon_{22} + K_{12}(\varepsilon_{33} + \varepsilon_{11}) - \lambda & 2K_{44}\varepsilon_{23} \\ 2K_{44}\varepsilon_{13} & 2K_{44}\varepsilon_{23} & K_{11}\varepsilon_{33} + K_{12}(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}) - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{III.11})$$

avec $\lambda = \omega^2 - \omega_0^2$, et comme $\omega \cong \omega_0$, on peut calculer directement la déviation en fréquence $\Delta\omega = \omega - \omega_0 = \lambda/2\omega_0$.

La résolution de l'équation séculaire donne une relation entre la fréquence Raman de chacun des trois modes en fonction de la déformation. Les modes sont décrits par les vecteurs propres du système. Cependant, il est important de noter que l'équation (III.11) est donnée dans le système cristallographique de référence: $x=[100]$, $y=[010]$ et $z=[001]$. Comme les structures microélectroniques peuvent être orientées différemment, il conviendra dans ce cas d'effectuer au préalable une transformation tensorielle, afin de résoudre cette équation dans le système cristallographique du motif étudié.

En l'absence de déformations, les tenseurs Raman ($\mathbf{R}^{(0)}$) et leurs vecteurs de polarisation correspondants ($\mathbf{v}^{(0)}$), décrivant les trois modes optiques du silicium, sont donnés par [69]:

$$\mathbf{R}_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \\ 0 & d & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}_3^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{III.12})$$

$$\mathbf{v}_1^{(0)} = (1 \ 0 \ 0), \quad \mathbf{v}_2^{(0)} = (0 \ 1 \ 0), \quad \mathbf{v}_3^{(0)} = (0 \ 0 \ 1) \quad (\text{III.13})$$

où d est une constante de proportionnalité.

En présence de déformations, les vecteurs de polarisation $\mathbf{v}_i^{(\varepsilon)}$ sont donnés par les vecteurs propres, issus de la résolution de l'équation séculaire (III.11). Les tenseurs Raman $\mathbf{R}_i^{(\varepsilon)}$ sont ensuite calculés par la formule [70,71]:

$$\mathbf{R}_i^{(\varepsilon)} = \sum_{k=1}^3 \mathbf{R}_i^{(0)} \frac{\partial \mathbf{v}_k^{(0)}}{\partial \mathbf{v}_i^{(\varepsilon)}} \quad (\text{III.14})$$

L'intensité I_j du signal Raman correspondant au mode j est fonction des vecteurs de polarisation de la lumière incidente (\mathbf{e}_i) et réfléchi (\mathbf{e}_r), selon la formule:

$$I_j = C \cdot \left| \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{R}_j^{(\varepsilon)} \cdot \mathbf{e}_r \right|^2 \quad (\text{III.15})$$

D'après cette formule, on constate que suivant le choix des vecteurs de polarisation, certains modes Raman peuvent être invisibles. Dans certaines configurations, il se peut même qu'aucun des trois modes ne soit visible.

III.3.3 Méthode de simulation de la spectroscopie micro-Raman

III.3.3.1 Corrections liées au laser utilisé

En vue de comparer les calculs théoriques avec les mesures expérimentales, il faut tenir compte des limitations physiques du laser utilisé, et plus particulièrement de la largeur du faisceau et de sa profondeur de pénétration dans le cristal. Il est généralement admis que l'intensité d'un faisceau laser de longueur d'onde λ décroît exponentiellement avec la profondeur, en fonction du coefficient d'absorption α du matériau à cette longueur d'onde [70,72]. La figure III.9 illustre schématiquement la dispersion en volume du faisceau incident. Le coefficient '2' qui apparaît dans le facteur d'atténuation β_z à la figure III.9 tient compte du trajet incident et réfléchi dans l'échantillon. La deuxième correction à apporter aux calculs provient de la largeur du faisceau laser. L'intensité à la surface de l'échantillon éclairé est supposée suivre une loi gaussienne, de déviation standard σ_x . On définit pour cela un facteur d'atténuation latérale β_x (figure III.9).

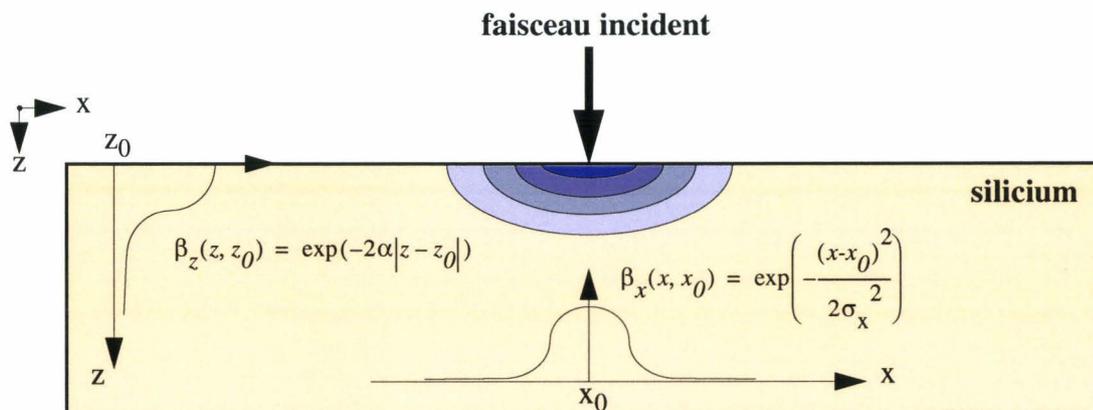


Figure III.9: Atténuation du signal Raman dans le substrat de silicium.

Il est généralement souhaitable d'avoir la plus faible dispersion possible, tant latéralement qu'en profondeur dans l'échantillon. Les lasers les plus couramment utilisés en spectroscopie Raman sont des lasers d'Argon, dont les principales caractéristiques de dispersion sont données au tableau III.3. D'après ces données, on remarque que la meilleure résolution correspond au laser fonctionnant dans la gamme des ultraviolets. Cette propriété remarquable vient du fait que le coefficient d'absorption du silicium augmente fortement au voisinage de la bande interdite (directe) au point Γ [74].

Tableau III.3: Propriétés des principaux laser d'Argon utilisés en micro-Raman [66,73].

longueur d'onde λ [nm]	longueur d'onde λ [eV]	profondeur de pénétration α [nm]	largeur du faisceau à $1/e^2$ [μm]	déviaton standard σ_x [μm]
514.5 (vert)	2.41	760	~ 1.2	~ 0.30
488.0 (bleu-vert)	2.54	570	~ 1.0	~ 0.25
457.9 (bleu)	2.71	320	~ 0.9	~ 0.22
364.0 (UV)	3.40	12	~ 0.6	~ 0.15

III.3.3.2 Intégration numérique du modèle

Nous nous intéressons dans cette partie à l'intégration du modèle dans nos outils de simulation 2D (IMPACT) et 3D (DIFOX). Le modèle étant équivalent pour les deux approches, nous décrivons l'algorithme de calcul en 2D, et nous précisons, le cas échéant, les particularités de l'extension en 3D. De plus, nous nous limiterons à l'analyse d'une mesure unidimensionnelle micro-Raman, c'est-à-dire au balayage rectiligne de la surface supérieure de l'échantillon. L'extension du modèle au cas de balayage d'une surface, très peu utilisé en pratique, ne présente aucune difficulté et est décrit en fin de section.

i. 1^{ère} méthode- Le premier modèle complet de calcul est l'œuvre de DeWolf [70,71]. Son principe est le suivant: partant d'une coupe 2D d'un motif particulier, les contraintes sont calculées analytiquement en un nombre arbitraire N de points de coordonnées (x_i, z_i) . Les déformations élastiques correspondantes en sont extraites, grâce à la matrice de compliance du silicium. Grâce à l'équation séculaire, les déviations de fréquence Raman sont calculées pour l'ensemble de ces points (équation (III.11)). Puis, les déviations de fréquence $\Delta\omega_j^{\text{pic}}$ des trois modes Raman pour chaque point (x_0, z_0) de balayage choisi en surface sont obtenus en sommant les contributions de tous les points (x_i, z_i) du silicium, en tenant compte de la largeur ($\beta_x(x_i, x_0)$) et de l'atténuation en profondeur ($\beta_z(z_i, z_0)$) du faisceau (figure III.9):

$$\Delta\omega_j^{\text{pic}}(x_0, z_0) = \left(\sum_{i=1}^N \beta_x(x_i, x_0) \cdot \beta_z(z_i, z_0) \cdot \Delta\omega_j^{\text{pic}}(x_i, z_i) \right) / B(x_0, z_0) \quad (\text{III.16})$$

où $B(x_0, z_0)$ correspond au coefficient de normalisation, c'est à dire:

$$B(x_0, z_0) = \sum_{i=1}^N \beta_x(x_i, x_0) \cdot \beta_z(z_i, z_0) \quad (\text{III.17})$$

Enfin, une correction doit être faite pour tenir compte de la différence d'intensité entre les trois modes Raman (équation (III.15)). La déviation de fréquence globale $\Delta\omega^{\text{pic}}(x_0, z_0)$, au point de mesure (x_0, z_0) , est donc:

$$\Delta\omega^{\text{pic}}(x_0, z_0) = \sum_{j=1}^3 \alpha_j \cdot \Delta\omega_j^{\text{pic}}(x_0, z_0), \quad \text{avec } \alpha_j = I_j / \left(\sum_{i=1}^3 I_i \right) \quad (\text{III.18})$$

Néanmoins, une approximation relativement importante est considérée dans cette procédure. En effet, le calcul de la contribution de tous les points (x_i, z_i) au point de mesure (x_0, z_0) de l'équation (III.16) ne tient pas compte de la forme du spectre Raman. Le calcul ne porte que sur les moyennes des distributions (i.e., $\Delta\omega_j^{\text{pic}}$), ce qui n'est pas mathématiquement correcte. Il faut considérer toutes les distributions des points (x_i, z_i) pour évaluer leur contribution en (x_0, z_0) . L'erreur introduite dans cette méthode demeure raisonnable si les déformations varient peu sur l'ensemble du volume "éclairé" par le faisceau laser [71]. Ceci étant, cette erreur peut être significative dans le cas contraire, comme par exemple aux bords d'une tranchée (i.e., isolation STI), où se côtoient des zones de fortes compressions ($\Delta\omega^{\text{pic}} > 0$) et tensions ($\Delta\omega^{\text{pic}} < 0$) [75].

ii. 2^{de} méthode- La correction à apporter à la méthode de DeWolf a été suggérée par Pinardi [72]. L'idée est de réaliser, dans un premier temps, la convolution des distributions lorentziennes du spectre Raman pour chaque abscisse x choisi de l'échantillon. Pour le mode Raman j , cela donne:

$$I(\Delta\omega_j, x) = \int_{z_0}^{\infty} \frac{\beta_z(z, z_0)}{\left(\frac{\Delta\omega_j - \Delta\omega_j^{\text{pic}}(x, z)}{A} \right)^2 + 1} dz \quad (\text{III.19})$$

où A correspond à la largeur à mi-hauteur de la distribution et $\Delta\omega_j^{\text{pic}}(x, z)$ est la moyenne de la distribution lorentzienne, obtenue par résolution de l'équation séculaire. Le spectre final de ce mode au point de mesure (x_0, z_0) est calculée par convolution sur l'ensemble des spectres $I(\Delta\omega_j, x)$:

$$I(\Delta\omega_j, x_0, z_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \beta_x(x, x_0) \cdot I(\Delta\omega_j, x) dx \quad (\text{III.20})$$

La déviation de fréquence $\Delta\omega_j^{\text{pic}}(x_0, z_0)$ pour le mode de Raman j , au point (x_0, z_0) , s'obtient en recherchant le maximum de la fonction $I(\Delta\omega_j, x_0, z_0)$. Enfin, comme pour la première méthode, la moyenne pondérée à partir des amplitudes en intensité des trois modes est utilisée pour extraire la valeur finale de la déviation.

iii. Implémentation- L'intégration logicielle de la seconde méthode a été réalisée. Une discrétisation spatiale et fréquentielle est effectuée. La première est nécessaire au calcul des intégrales apparaissant dans les équations (III.19) et (III.20). La seconde est requise pour calculer les distributions lorentziennes, puis rechercher le maximum de leur convolution (un pas de fréquence de 0.005cm^{-1} , bien inférieur à la sensibilité expérimentale, a été choisi). La convolution définie par l'équation (III.19) est obtenue en "découpant" le silicium en M tranches verticales comme l'illustre le schéma de la figure III.10. Pour une tranche k quelconque, on effectue la convolution $I(\Delta\omega_j, x_k)$ de toutes les lorentziennes calculées aux nœuds du maillage éléments-finis appartenant à cette tranche. La largeur d'une tranche doit être suffisamment petite devant la largeur du faisceau laser. En pratique, la largeur de chaque tranche vaut 1/4 de la déviation standard de la loi gaussienne décrivant la dispersion de l'intensité. Ensuite, on construit la convoluée globale (équation (III.20)) pour tout point de mesure (x_0, z_0) en sommant la contribution de chaque tranche:

$$I(\Delta\omega_j, x_0, z_0) = \sum_{k=1}^M I_x(x_k, x_0) I(\Delta\omega_j, x_k) \quad (\text{III.21})$$

La recherche du maximum de cette distribution en fonction de la déviation en fréquence $\Delta\omega_j$ permet de déterminer la déviation effective au point considéré, pour le $j^{\text{ème}}$ mode Raman.

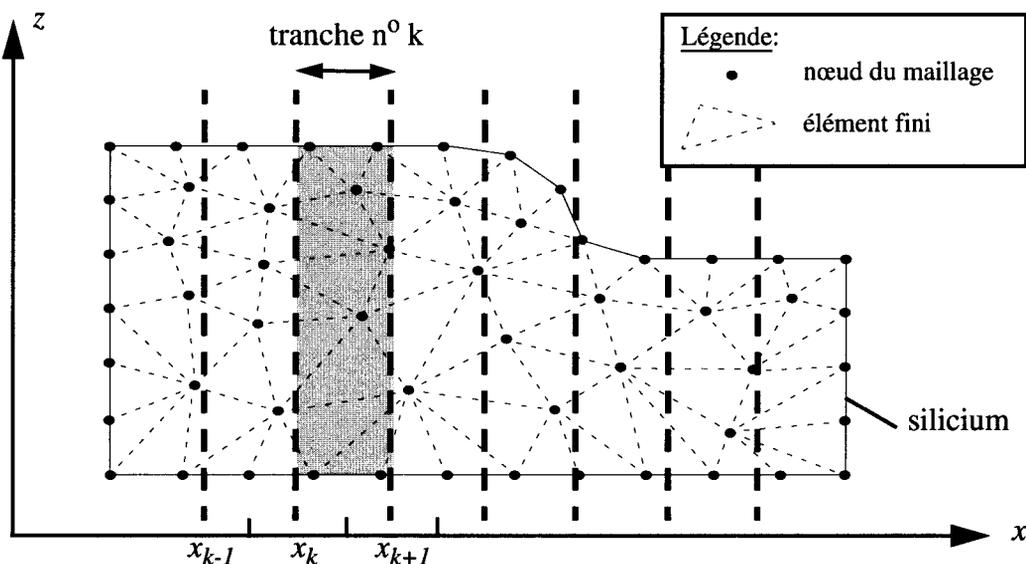


Figure III.10: Discretisation spatiale pour le calcul micro-Raman.

iii. Extensions: balayage 2D et modèle 3D- Une étude récente a démontré la possibilité de réaliser une cartographie 2D des contraintes par spectroscopie micro-Raman [76,77]. Considérons à titre d'exemple que la structure de la figure III.10 correspond à la coupe d'un échantillon donné, sur laquelle on souhaite réaliser un balayage 2D par spectroscopie micro-Raman. Le modèle décrit précédemment peut être étendu sans difficultés pour extraire la distribution 2D des déviations de fréquence Raman. Le faisceau laser étant circulaire, il suffit d'introduire une décroissance en intensité dans la direction z analogue à celle fixée pour la

direction x . Par ailleurs, il n'y a plus besoin de modéliser l'absorption en profondeur dans la coupe car IMPACT-4 considère que la contrainte est uniforme dans la direction normale au plan de simulation. Il n'est donc plus nécessaire de décomposer le substrat de silicium en sous-domaines pour effectuer la convolution des lorentziennes en profondeur.

En ce qui concerne le modèle en 3D, la distinction entre balayage 1D ou 2D n'a plus lieu d'être: dans les deux cas on décompose le silicium, selon la direction du faisceau laser, en parallélépipèdes étroits, de manière similaire à ce qui est fait en 2D (voir figure III.10). L'intégration en profondeur pour chaque sous-domaine, puis sur la surface éclairée, est également la même qu'en 2D.

III.3.4 Exemples

Pour illustrer l'application du modèle de calcul de déviations de fréquence Raman, nous donnons dans ce paragraphe deux exemples simples: l'un mettant en évidence, dans le cas d'un balayage 1D, l'effet de la largeur du faisceau laser sur la résolution; l'autre illustrant l'application du modèle en 3D pour obtenir des champs bidimensionnels de déviations de fréquence Raman.

i. Effet de la largeur du faisceau laser

La structure utilisée pour cet exemple correspond à une isolation par tranchées (STI) qui a fait l'objet d'une caractérisation très approfondie par cette technique de spectroscopie que nous détaillerons au chapitre V [73,78]. Une description simplifiée de la géométrie du motif étudié est représentée à la figure III.11. Des mesures de déviations de fréquence Raman, réalisées par un balayage 1D à la surface de l'échantillon, sont également données sur cette figure. Les différentes étapes du procédé technologique précédant la mesure sont les suivantes: gravure des tranchées dans le substrat ($\sim 400\text{nm}$) en utilisant un masque d'isolation formé par un bicouche oxyde (20nm)/nitrure (200nm); suit une faible oxydation en ambiance sèche à 1050°C des flancs des tranchées ($\sim 20\text{ nm}$); les tranchées sont ensuite remplies par un oxyde déposé à 850°C ($\sim 550\text{nm}$) dans un réacteur LPCVD, en utilisant le TEOS comme précurseur. Enfin, cet oxyde est densifié à 850°C en ambiance humide. La spectroscopie Raman est réalisée après le polissage de la structure par gravure CMP (*Chemical Mechanical Polishing*), juste avant le retrait du masque de nitrure.

La figure III.11 compare les mesures faites sur ce motif avec deux sources différentes d'excitation: l'une utilisant un laser bleu à 458 nm , l'autre est une source UV à 364 nm . Des balayages 1D à la surface de l'échantillon sont réalisés sur le même motif, défini par un mesa de silicium de $3\mu\text{m}$ de large par 2mm de long et isolé par deux tranchées remplies. Les résultats obtenus par simulation sont superposés aux mesures. Plusieurs remarques peuvent être faites après cette comparaison. On constate tout d'abord que l'utilisation d'un laser à plus faible longueur d'onde accentue l'amplitude des déviations de fréquence Raman, quelles soient positives ou négatives. L'augmentation des déviations au centre du motif, où les contraintes varient peu, s'explique par la très faible atténuation par absorption du laser UV. Par contre, la réduction importante des pics compressifs très étroits, localisés aux bords des tranchées, est due

à la largeur du faisceau plus importante pour le laser bleu ($\sim 0.9 \mu\text{m}$), comparée à celle du laser UV ($\sim 0.6 \mu\text{m}$). En effet, la dispersion latérale a pour effet de moyenniser les déviations sur une plus grande surface. Le modèle implanté dans IMPACT tient compte de ces limitations physiques des lasers, ce qui permet d'obtenir un bon accord avec les mesures expérimentales.

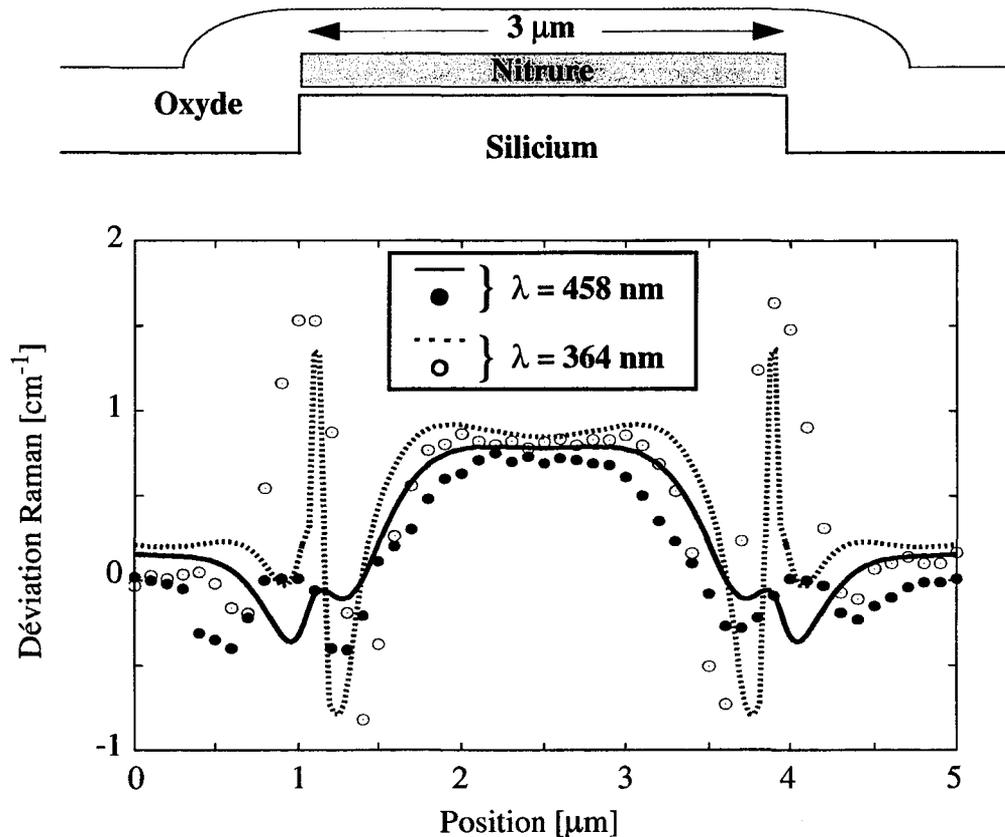


Figure III.11: Comparaison des déviations de fréquence obtenues avec des lasers de longueurs d'onde différentes (cercles pleins: $\lambda=364 \text{ nm}$; cercles vides: $\lambda=458 \text{ nm}$). Les lignes correspondent aux résultats de simulation.

ii. Champs bidimensionnels de déviations de fréquence Raman

L'exemple que l'on présente maintenant illustre la possibilité de calculer une distribution 2D de déviations en fréquence Raman. Pour cela, une structure d'isolation de type LOCOS est simulée grâce au module tridimensionnel d'oxydation-diffusion: DIFOX [79,80]. Un dessin de masque ("*layout*") conventionnel, dont les dimensions sont données à la figure III.12.a, a été imaginé pour cette structure. Les masques d'isolation sont des carrés de $2 \times 2 \mu\text{m}^2$, composés d'une couche sacrificielle d'oxyde de 40 nm et d'un film de nitrure de 300 nm d'épaisseur. L'utilisation de conditions aux limites symétriques, prenant en compte la périodicité de la structure (cf. §II.3.2), permet de restreindre le domaine simulé, comme illustré à la figure III.12.a. Le profil de la pression hydrostatique du motif après oxydation est représenté à la figure III.12.b.

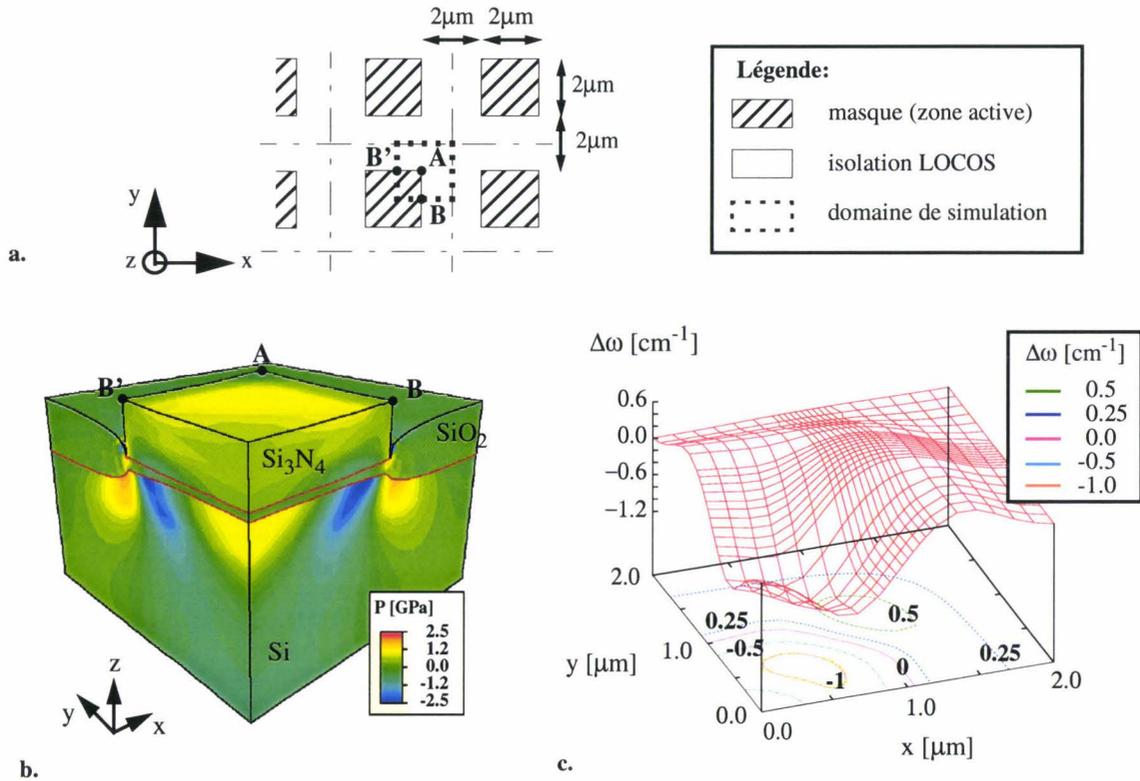


Figure III.12: Simulation 3D d'une structure LOCOS réalisée à 900 °C pendant 150 min. Définition du dessin de masque (*layout*) (a); Pression hydrostatique après oxydation (b); Champ de déviations de fréquence Raman correspondant (c).

Sur la topographie simulée, on note que le soulèvement du masque de nitrure est légèrement supérieur selon la diagonale que suivant les axes principaux x et y . En effet, au coin du masque (point A), l'occupation relative de surface masquée est de $1/4$, alors qu'elle n'est que de $1/2$ pour les zones de masquage pseudo-1D (point B ou B'). On peut donc dire, en première approximation, que le masquage sera deux fois moins efficace aux coins des zones actives que sur le reste du périmètre. Il en résulte l'apparition d'un bec d'oiseau plus large au niveau de ces zones moins protégées. Les mesures des hauteurs de bords d'oiseau (96nm en B et B', 147nm en A), donnent un ratio supérieur à $1/2$ entre les points B et B' et le point A. D'autres phénomènes comme l'effet 3D des contraintes sur la cinétique d'oxydation, font qu'une approche consistant à simuler la structure en 2D (selon x par exemple), puis à extrapoler la topographie 3D du motif à partir du layout, n'est pas possible. Pour mettre en évidence encore plus clairement cet effet 3D, une simulation de balayage par micro-Raman est représentée à la figure III.12.c. Les résultats correspondent à l'utilisation d'un laser conventionnel à 458 nm. On constate nettement que le pic en tension (i.e., la déviation négative), proportionnelle à la déflexion du film de nitrure, est bien maximale près du coin du masque ($\Delta\omega \sim -1 \text{ cm}^{-1}$). L'effet 3D sur la topographie est donc en accord avec le champ de contraintes simulé.

En conclusion, parmi les techniques de mesure de contraintes en technologies silicium, la spectroscopie Raman présente le meilleur compromis résolution/vitesse d'acquisition. Cette technique sera utilisée pour calibrer les modèles numériques que nous présentons maintenant.

Références Bibliographiques du Chapitre III

- [1] S.M. HU, *Stress-Related Problems in Silicon Technology*, J. Appl. Phys., **70**(6), pp. R53-80, 1991.
- [2] L. MAISSEL, *Thermal Expansion of Silicon*, J. Appl. Phys., **50**(7), p. 211, 1960.
- [3] *Properties of Silicon*, INSPEC, Ed. The Gresham Press, Surrey, England, 1988.
- [4] T. SUZUKI, A. MIMURA et T. OGAWA, *The Deformation of Polycrystalline-Silicon Deposited on Oxide-Covered Single Crystal Silicon Substrates*, J. Electrochem. Soc., **124**(11), pp. 1776-1780, 1977.
- [5] Y.-L. SHEN, *Modeling of Thermal Stresses in Metal Interconnects: Effects of Line Aspect Ratio*, J. Appl. Phys., **82**(4), pp. 1578-1581, 1997.
- [6] Corning Glass Works, Fused Silica, 7940 Data Sheets, Corning, New-York, 1978.
- [7] O.V. MAZURIN, M.J. STRELTSINA et T.P. SHAIKO-SHAIKOVSKAYA, *Handbook of Glass Data*, Ed. Elsevier Amsterdam, pp. 31-44, 1983.
- [8] G. HETHERINGTON, Bull. Soc. Fr. Ceram., **55**, p. 3, 1962.
- [9] M. STADTMÜELLER, *Mechanical Stress in CVD-Dielectrics*, J. Electrochem. Soc., **139**(12), pp. 3669-3674, 1992.
- [10] D. TEMPLE, A. REISMAN, G.G. FOUNTAIN, M. WALTERS et S.V. HATTANGADY, *Mechanical Stress in SiO₂ Films obtained by Remote Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition*, J. Electrochem. Soc., **140**(2), pp. 564-567, 1993.
- [11] P. AMBRÉE, F. KELLER, R. WOLF et K. WANDEL, *Determination of the Mechanical Stress in Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition SiO₂ and SiN layers*, J. Vac. Sci. Technol. B, **11**(3), pp. 614-617, 1993.
- [12] K. RAMKUMAR et A.N. SAXENA, *Stress in SiO₂ Deposited by Plasma and Ozone Tetraethylorthosilicate Chemical Vapor Deposition Processes*, J. Electrochem. Soc., **139**(5), pp. 1437-1442, 1992.
- [13] G. SMOLINSKY et T.P.H.F. WENDLING, *Measurements of Temperature Dependant Stress of Silicon Oxide Films Prepared by a Variety of CVD Methods*, J. Electrochem. Soc., **132**(4), pp. 950-954, 1985.
- [14] L. DOUCET, *Caratérisation Mécanique et Physico-Chimique des Matériaux Métalliques et Diélectriques dans les Structures d'Interconnexions destinés à la Micro-Electronique*, Thèse de doctorat, INPG, 1996.
- [15] A. LAHAV, K.A. GRIM et I.A. BLECH, *Measurement of Thermal Expansion Coefficients of W, WSi, WN, and WSiN Thin Film Metallizations*, J. Appl. Phys., **67**(2), pp. 734-738, 1990.
- [16] TENCOR Instruments, *Application note #3: Linear Thermal Expansion Coefficient and*

Biaxial Modulus, 1993.

- [17] **D.S. GARDNER, H.P. LONGWORTH et P.A. FLINN**, *Detection of Reactions and Changes in Thin Film Morphology using Stress Measurements*, J. Vac. Sci. Technol. A, **10**(4), pp. 1426-1441, 1992.
- [18] **G.V. SAMSONOV et I.M. VINITSKII**, *Handbook of Refractory Compounds*, IFI/Plenum Data Company, New York, 1980.
- [19] **Y. SHACHAM-DIAMAND et Y. NACHUMOVSKY**, *Process Reliability Considerations of Planarization with Spin-On-Glass*, J. Electrochem. Soc., **137**(1), pp. 190-196, 1990.
- [20] **Y. HOMMA, T. FURUSAWA, H. MORISHIMA et H. SATO**, *Low Permittivity Dielectrics and Global Planarization for Quarter-Micron Multilevel Interconnections*, Solid-State Electron., **41**(7), pp. 1005-1011, 1997.
- [21] **Y.K. SIEW, G. SARKAR, X. HU, J. HUI, A. SEE et C. CHUA**, *Thermal Curing of Hydrogen Silesquioxane*, J. Electrochem. Soc., **147**(1), pp. 335-339, 2000.
- [22] **J.-H. ZHAO, I. MALIK, T. RYAN, E.T. OGAWA, P.S. HO, W.-Y. SHIH, A.J. MCKERROW et K.J. TAYLOR**, *Thermomechanical Properties and Moisture Uptake Characteristics of Hydrogen Silesquioxane Submicron Films*, Appl. Phys. Lett., **74**(7), pp. 944-946, 1999.
- [23] **T. SUZUKI, A. MIMURA et T. OGAWA**, *The Deformation of Polycrystalline-Silicon Deposited on Oxide-Covered Single Crystal Silicon Substrates*, J. Electrochem. Soc., **124**(11), pp. 1776-1780, 1977.
- [24] **O. TABATA, S. SUGIYAMA et M. TAKIGAWA**, *Control of Internal Stress and Young's Modulus of Si_3N_4 and Polycrystalline Silicon Thin Films using the Ion Implantation Technique*, Appl. Phys. Lett., **56**, pp. 1314-1316, 1990.
- [25] **P. LEDUC**, *Etudes des Contraintes Mécaniques dans les Edifices d'Interconnexions d'un Procédé Submicronique*, Thèse de doctorat, USTL, 1999.
- [26] **N. NAGASIMA, H. SUZUKI, K. TANAKA et S. NISHIDA**, *Interaction Between Phosphosilicate Glass Films and Water*, J. Electrochem. Soc., **121**(3), pp. 434-438, 1974.
- [27] **M. YOSHIMARU et H. MATSUHASHI**, *Moisture Resistance of Annealed Borophosphosilicate Glass Films for VLSI Circuit Applications*, J. Electrochem. Soc., **143**(9), p. 3032, 1996.
- [28] **K. RAMKUMAR, S.K. GHOSH et A.N. SAXENA**, *Stress Variations in TEOS-Based SiO_2 Films during Ex-Situ Thermal Cycling*, J. Electrochem. Soc., **140**(9), pp. 2669-2673, 1993.
- [29] **M.H. PARK, S.H. HONG, S.J. HONG et T. PARK**, *Stress Minimization in Deep Sub-Micron Full CMOS Devices by using an Optimized Combination of the Trench Filling CVD Oxides*, IEDM Tech. Dig., pp. 669-672, 1997.
- [30] **H. MIURA et A. NISHIMURA**, *Effect of Phosphorus Doping on Crystallization-Induced Stress of Silicon Thin Films*, JSME Int. J., **39**(4), pp. 620-625, 1996.
- [31] **H.-J. HERZOG, L. CSEPREGI et H. SEIDEL**, *X-Ray Investigation of Boron- and Germanium-Doped Silicon Epitaxial Layers*, J. Electrochem. Soc., **131**, pp. 2969-2974, 1984.

- [32] S.K. JONES, A. PONCET, I. DEWOLF, M.M. AHMED et W.J. ROTHWELL, *An Advanced Calibration Method for Modelling Oxidation and Mechanical Stress in Sub-Micron CMOS Isolation Structures*, IEDM Tech. Dig., pp. 877-880, 1994.
- [33] A. STEEGEN, I. DEWOLF et K. MAEX, *Characterization of the Local Mechanical Stress Induced during Ti and Co/Ti Salicidation in Sub-0.25 μ m Technologies*, J. Appl. Phys., **86**(8), pp. 4290-4297, 1999.
- [34] A. TIXIER, *Etude et Caractérisation de Structures d'Isolation de Type LOCOS pour une Technologie CMOS 0.35 μ m*, Thèse de doctorat, USTL, 1998.
- [35] A. CHATTERJEE, I. ALI, K. JOYNER, D. MERCER, J. HUEHNE et M. MASON, *Integration of Unit Processes in a Shallow Trench Isolation Module for a 0.25 μ m CMOS Technology*, J. Vac. Sci. Technol. B, **15**(6), pp. 1936-1942, 1997.
- [36] S. NAG, A. CHATTERJEE, K. TAYLOR et I.C. CHEN, *Comparative Evaluation of Gap-Fill Dielectrics in Shallow Trench Isolation for Sub-0.25 μ m Technologies*, IEDM Tech. Dig., pp. 841-844, 1996.
- [37] K. MAEX, *Silicides for Integrated Circuits: TiSi₂ and CoSi₂*, Materials Science and Engineering, **R11**, pp. 53-153, 1993.
- [38] K.W. MCELHANEY, J.J. VLASSAK et W.D. NIX, *Determination of indenter tip geometry and indentation contact area for depth-sensing indentation experiments*, Journal of materials research, **13**(5), pp. 1300-1306, 1998.
- [39] G. CARLOTTI, D. FIORETTO, G. SOCINO, B. RODMACQ et V. PELOSIN, J. Appl. Phys., **71**(10), p. 4897, 1992.
- [40] W.A. BRANTLEY, *Calculated Elastic Constants for Stress Problems Associated with Semiconductor Devices*, J. Appl. Phys., **44**, pp. 534-535, 1973.
- [41] N. BEAUMONT, J.M. DIANI et L. PENAZZI, *Introduction au Comportement des Matériaux et à sa Modélisation*, Ed. ENSTA, 1992.
- [42] G. CARLOTTI, G. SOCINO et L. DOUCET, *Elastic Properties of Spin-on Glass Thin Films*, Appl. Phys. Lett., **66**, pp. 2682-2684, 1995.
- [43] T.F. RETAJEZYK et A.K. SINHA, *Thin Solids Films*, **70**, p. 241, 1980.
- [44] J.-H. ZHAO, I. MALIK, T. RYAN, E.T. OGAWA, P.S. HO, W.-Y. SHIH, A.J. MCKERROW et K.J. TAYLOR, *Thermomechanical Properties and Moisture Uptake Characteristics of Hydrogen Silsesquioxane Submicron Films*, Appl. Phys. Lett., **74**(7), pp. 944-946, 1999.
- [45] P.A. FLINN, D.S. GARDNER et W.D. NIX, *Measurement and Interpretation of Stress in Aluminum-based Metallization as a Function of Thermal History*, IEEE Trans. Electron Dev., **34**, pp. 689-698, 1987.
- [46] G.J. LEUSINK, T.G.M. OOSTERLAKEN, G.C.A.M. JANSSEN et S. RADELAAR, J. Appl. Phys., **74**, p. 3899, 1993.
- [47] L. MANIGUET, M. IGNAT, M. DUPEUX, P.A. FLINN, P. NORMANDON, P. GERGAUD et J.J. BACMANN, *Advanced Metallization for ULSI Applications*, Proceeding of MRS, p. 67,

1993.

- [48] K. MAEX, M. VANROSSUM et A. READER, *Properties of Metal Silicides*, K.Maex and M. VanRossum Eds., IMEC, Belgium, 1995.
- [49] A. STEEGEN et K. MAEX, *Characterization of the Mechanical Stress Induced during the Silicidation of Sub-0.25 μ m MOS Technologies*, Proc. of MRS, **611**, 2000 (à paraître).
- [50] R.J. JACCODINE et W.A. SCHLEGEL, *Measurement of Strains at Si-SiO₂ Interface*, J. Appl. Phys., **37**(6), pp. 2429-2434, 1966.
- [51] A. SHINTANI, S. SUGAKI et H. NAKASHIMA, *Temperature Dependence of Stresses in Chemical Vapor Deposited Vitreous Films*, J. Appl. Phys., **51**(8), pp.4197-4205, 1980.
- [52] G.G. STONEY, *The Tension of Metallic Films Deposited by Electrolysis*, Proc. Roy. Soc., London, **82**, p. 172, 1909.
- [53] I.-S. YEO, P.S. HO et S.H. ANDERSON, *Characteristics of Thermal Stresses in Al(Cu) Fine Lines. I. Unpassivated Line Structures*, J. Appl. Phys., **78**(2), pp. 945-952, 1995.
- [54] TENCOR Instruments, *Application note #8: Stress Measurement of Multiple Films*, 1993.
- [55] B. WILLIAMS et C. CARTER, *Transmission Electron Microscopy*, Plenum Press New York and London, **4**, p. 303, 1996.
- [56] W. KOSSEL et G. MÖLLENSTEDT, Ann. der Phys., **36**(26), p. 113, 1939.
- [57] P.M. JONES, G.M. RACKHAM et J.W. STEEDS, Proc. Roy. Soc., **A354**, p. 197, 1977.
- [58] J. VANHELLEMONT, A. ARMIGLIATO, R. BALBONI, S. FRABBONI, K. JANSSENS, *On the TEM Assesment on the Strain Distribution in IC Structures*, Proc. ICEM, **2A**, p. 651, 1994.
- [59] A. ARMIGLIATO, R. BALBONI, I. DEWOLF, S. FRABBONI, K. JANSSENS et J. VANHELLEMONT, *Determination of Lattice Strain in Local Isolation Structures by Electron Diffraction Techniques and Micro-Raman Spectroscopy*, Microsc. Semicond. Mater. Conf., **134**(5), p. 229, 1993.
- [60] G. MAEDER, Rev. Française de Mécanique, **82**, p. 57, 1982.
- [61] D. LAGOMARSINO, IESS-CNR (Italy), communications privées, 2000.
- [62] B. GREENEBAUM, A.I. SAUTER, P.A. FLINN et W.D. NIX, *Stress in Metal Lines under Passivation; Comparison of Experiment with Finite Element Calculations*, Appl. Phys. Lett., **58**(17), pp. 1845-1847, 1991.
- [63] J. LEE, Q. MA, T. MARIEB, A.S. MACK, H. FUJIMOTO, P.A. FLINN, B. WOOLERY et L. KEYS, *Measurement and Modeling of Intrinsic Stresses in CVD W Lines*, Mat. Res. Soc. Symp., **391**, pp. 115-119, 1995.
- [64] J. DESMARET, R. HULL, K. SCHONENBERG et K. JANSSENS, *Nanoscale Characterization of Stresses in Semiconductor Devices*, ISDRS Tech. Dig., p. 535-537, 1999.
- [65] A.P. RODRIGUEZ, A.R. RODRIGUEZ, R. CABEZAS, J.R. MORANTE, T. JAWHARI et C.E. HUNT, J. Appl. Phys., **80**, p. 5736, 1996.

- [66] I. DEWOLF, *Micro-Raman Spectroscopy to Study Local Mechanical Stress in Silicon Integrated Circuits*, *Semicond. Sci. Technol.*, **11**, pp.139-154, 1996.
- [67] S. GANESAN, A.A. MARADUDIN et J. OITMAA, *Ann. Phys.*, **56**, p.556, 1970.
- [68] E. ANASTASSAKIS, A. CANTARERO et M. CARDONA, *Phys. Rev. B*, **41**, p.7529, 1990.
- [69] R. LOUDON, *Adv. Phys.*, **13**, p.423, 1964.
- [70] I. DEWOLF, H.E. MAES et S.K. JONES, *Stress Measurements in Silicon Devices through Raman Spectroscopy: Bridging the Gap between Theory and Experiment*, *J. Appl. Phys.*, **79**(9), pp. 7148-7156, 1996.
- [71] I. DEWOLF et E. ANASTASSAKIS, "Addendum to 'Stress Measurements in Silicon Devices through Raman Spectroscopy: Bridging the Gap between Theory and Experiment'", *J. Appl. Phys.*, **85**(10), pp. 7484-7485 (1999).
- [72] K. PINARDI, S.C. JAIN, M. WILLANDER, A. ATKINSON, H.E. MAES et R. VAN OVERSTRAETEN, *A method to Interpret Micro-Raman Experiments made to Measure Nonuniform Stresses: Application to Local Oxidation of Silicon Structures*, *J. Appl. Phys.*, **84**(5), pp. 2507-2512, 1997.
- [73] K.F. DOMBROWSKI, I. DEWOLF et B. DIETRICH, *Stress Measurements using Ultraviolet Micro-Raman Spectroscopy*, *Appl. Phys. Lett.*, **75**(16), pp. 2450-2451, 1999.
- [74] D.E. ASPNES et A.A. STUDNA, *Phys. Rev. B*, **27**, p.985, 1983.
- [75] K.F. DOMBROWSKI, IHP (Germany), communications privées, 1999.
- [76] I. DEWOLF, G. GROESENEKEN, H.E. MAES, M. BOLT, K. BARLA, A. READER et P.J. MCNALLY, *Micro-Raman Spectroscopy Evaluation of the Local Mechanical Stress in Shallow Trench Isolation CMOS Structures: Correlation with Defect Generation and Diode Leakage*, *Int. Symp. for Testing and Failure Analysis*, 1998.
- [77] I. DEWOLF, *Stress Measurements in Si Microelectronics Devices using Raman Spectroscopy*, *J. Raman Spectrosc.*, **30**, pp.877-883, 1999.
- [78] K.F. DOMBROWSKI et B. DIETRICH, *Investigation of Stress in STI using UV-Raman Spectroscopy*, *Proceedings of ESSDERC'99*, p. 196, 1999.
- [79] B. BACCUS, R. BOSSUT, S. BOZEK, J. HERBAUX, T. HOFFMANN, V. SENEZ, *DIFOX v.2.4: User's Guide*, 1999.
- [80] T. HOFFMANN et V. SENEZ, *Analysis of the stresses induced by silicon dioxide growth in STI using a 3-dimensional calibrated numerical oxidation modeling*, *ISDRS Tech. Dig.*, p. 207-210, 1999.

Chapitre IV : MODÉLISATION NUMÉRIQUE

Ce chapitre détaille les outils et modèles numériques utilisés dans ce travail de thèse pour calculer les contraintes mécaniques. Cette solution numérique est implémentée soit en 2D dans le simulateur de procédés technologiques IMPACT-4, soit en 3D dans le module DIFOX.

Après avoir présenté les limites d'une approche analytique pour traiter des problèmes à topographies complexes, nous développons le traitement numérique des principales lois de comportement complexe (viscoélasticité et élastoplasticité), puis nous exposons la stratégie employée pour modéliser les phénomènes générateurs de contraintes mécaniques.

IV.1 Modélisation analytique

L'approche la plus populaire en analyse structurale est la méthode des éléments finis. Son défaut majeur est d'être très consommatrice en termes de ressources de calcul, surtout lorsque l'étude est réalisée en 3D. Si l'on utilise des maillages relativement lâches pour réduire ce temps de calcul, on se trouve alors confronté aux erreurs de discrétisation. Pour cette raison, il est souhaitable de pouvoir confronter les résultats des simulations numériques 2D et 3D avec des modèles analytiques dans le but de les valider. Un autre avantage de ces modèles analytiques est qu'ils permettent une meilleure compréhension des mécanismes physiques mis en œuvre, par le biais d'une simple variation de paramètre des équations.

Il existe dans la littérature un certain nombre d'études portant sur la modélisation analytique de différentes sources de contraintes mécaniques en microélectronique. Néanmoins, elles sont le plus généralement restreintes à des géométries très simplifiées: films déposés sur des substrats parfaitement plans [1,2], ou tranchées gravées et remplies idéalement [3],... Si l'on considère par exemple la structure d'isolation de type LOCOS, Guillemot a certes établi une formulation analytique pour décrire la géométrie complexe de cette structure [4], mais il

n'existe pas à l'heure actuelle de modèle pour prédire le champ de contraintes associé. Seuls des travaux concernant l'oxydation du silicium sur des motifs idéaux de forme convexe (cylindres) ou concave (trous circulaires) ont permis de mettre en équation ces champs de contraintes [5].

Nous allons à présent décrire quelques modèles analytiques de contraintes pour des structures simples. Un de ces modèles est ensuite confronté au calcul numérique par éléments finis.

IV.1.1 Présentation de trois modèles analytiques

IV.1.1.1 Modèle de "la force locale" (The edge force model)

Le modèle de la force locale fut introduit par Hu pour l'analyse des contraintes induites dans le substrat par les bords de film [1]. Dans ce modèle, il est supposé que les contraintes sont générées par une force locale F , localisée au bord du film et orientée parallèlement à l'interface (direction x). L'amplitude de cette force est donnée par la relation:

$$F = h \cdot \sigma_{fxx} \quad (IV.1)$$

où h correspond à l'épaisseur du film, et σ_{fxx} représente la contrainte normale moyenne du film, dans la direction x .

Pour un réseau de N lignes, les composantes de contrainte du substrat sont calculées par simple application du principe de superposition des contribution de chaque ligne [6]:

$$\sigma_{xx}(z) = -\frac{2F}{\pi} \sum_N \left(\frac{(A+L)^3}{[(A+L)^2 + z^2]^2} - \frac{(A-L)^3}{[(A-L)^2 + z^2]^2} \right) \quad (IV.2)$$

$$\sigma_{zz}(z) = -\frac{2F}{\pi} z^2 \sum_N \left(\frac{(A+L)}{[(A+L)^2 + z^2]^2} - \frac{(A-L)}{[(A-L)^2 + z^2]^2} \right) \quad (IV.3)$$

$$\sigma_{xz}(z) = -\frac{2F}{\pi} z \sum_N \left(\frac{(A+L)^2}{[(A+L)^2 + z^2]^2} - \frac{(A-L)^2}{[(A-L)^2 + z^2]^2} \right) = \sigma_{zx} \quad (IV.4)$$

où $A = x - N(w + d)$ et $L = w/2$. Dans ces équations, w est la largeur des lignes, d est l'espacement des lignes, et les axes sont associés à la largeur des lignes (x), la longueur des lignes (y) et la profondeur (z). L'origine est prise au centre de la première ligne du réseau.

IV.1.1.2 Modèle de "la force distribuée" (The distributed force model)

Le modèle de "la force distribuée" constitue une amélioration du modèle de "la force locale" [2]. Il prend en considération le fait que la contrainte d'une ligne n'est pas constante, mais se relaxe à ses bords. Grâce à ce modèle, il est en outre possible de connaître la distribution des contraintes à la fois dans le film d'épaisseur h et de largeur w , mais aussi dans le substrat sous-jacent. Ce modèle suppose que la contrainte générée par la ligne dans le substrat est issue d'une force f , agissant à l'interface et dépendant de la position x :

$$f(x) = h \cdot \frac{\partial \sigma_{fxx}}{\partial x} \quad (IV.5)$$

où σ_{fxx} est définie par la relation:

$$\sigma_{fxx}(x) = \sigma_0 - \frac{2h}{\pi K} \int_{-\frac{w}{2}}^{\frac{w}{2}} \frac{\partial \sigma_{fxx}(u)}{\partial u} \frac{du}{x-u} \quad (IV.6)$$

où σ_0 est la contrainte correspondant au film uniforme (i.e., avant gravure des lignes), et le facteur K est directement lié au rapport des rigidités du film et du substrat:

$$K = \frac{E_s(1 - \nu_f^2)}{E_f(1 - \nu_s^2)} \quad (IV.7)$$

où E_i et ν_i sont respectivement le module d'Young et le coefficient de Poisson du substrat (indice s) et du film (indice f).

Les composantes de contraintes dans le substrat sont alors données par [7]:

$$\sigma_{XX}(x, z) = -\frac{2h}{\pi} \int_{-\frac{w}{2}}^{\frac{w}{2}} \frac{x^3}{(x^2 + z^2)^2} \frac{\partial \sigma_{fxx}(u)}{\partial u} \quad (IV.8)$$

$$\sigma_{ZZ}(x, z) = -\frac{2h}{\pi} \int_{-\frac{w}{2}}^{\frac{w}{2}} \frac{xz^2}{(x^2 + z^2)^2} \frac{\partial \sigma_{fxx}(u)}{\partial u} \quad (IV.9)$$

$$\sigma_{XZ}(x, z) = -\frac{2h}{\pi} \int_{-\frac{w}{2}}^{\frac{w}{2}} \frac{x^2 z}{(x^2 + z^2)^2} \frac{\partial \sigma_{fxx}(u)}{\partial u} = \sigma_{ZX}(x, z) \quad (IV.10)$$

Ces intégrales peuvent être résolues numériquement par la méthode des différences finies [7]. La comparaison avec les mesures indiquent que ce modèle donne une meilleure prédiction des contraintes dans le substrat au niveau des bords du film par rapport au modèle de "la force locale" [8].

IV.1.1.3 Modèles des isolations par tranchée

Hu a également publié un modèle analytique 3D pour calculer les contraintes engendrées par l'inclusion d'un parallélépipède dans un demi-espace [3]. Il applique ce modèle pour les structures de type tranchée [9]. Cependant, son étude se restreint aux contraintes d'origine thermique. Deux autres hypothèses simplificatrices sont également faites: le substrat de silicium est considéré comme élastiquement isotrope et la rigidité du matériau remplissant la tranchée est la même que celle du substrat. Hu a confronté ce modèle avec des mesures Raman faites par Nadahara [10]. Malheureusement, ces mesures se limitent à quelques points isolés au voisinage des tranchées, ce qui est insuffisant pour valider quantitativement le modèle de Hu.

Plus récemment, Slehor et Hobler ont amélioré le modèle de Hu pour calculer les champs de contrainte 3D près des tranchées [11]: l'une des améliorations apportées est la possibilité de définir des géométries plus complexes (i.e., arrondissement plus réaliste des coins de tranchée); une autre amélioration permet de calculer également les contraintes à l'intérieur de la tranchée. Néanmoins, aucune validation expérimentale n'a été menée et certaines des approximations du modèle de Hu (substrat isotrope et contrainte d'origine thermique seule) limitent à nouveau le champ d'application de ce modèle. En ce qui concerne l'hypothèse d'isotropie élastique du

substrat, nous avons montré par une analyse numérique que cette approximation ne modifie pas fondamentalement le niveau de contraintes des structures [12]. Maintenant, la considération de la seule origine thermique des contraintes est une hypothèse bien plus limitative car il est reconnu que les contraintes engendrées par les autres étapes de fabrication de ces structures (ex., oxydation de la tranchée avant remplissage) sont au moins aussi importantes que les contraintes thermiques [13].

IV.1.2 Comparaison des modèles analytiques et numériques

La comparaison de ces modèles est réalisée à partir d'une structure de test très simple, décrite à la figure IV.1.a [8]: sur un substrat (100) recouvert de 100nm d'oxyde, on réalise un réseau de lignes de W (CVD), de $0.7\mu\text{m}$ d'épaisseur, $3.8\mu\text{m}$ de largeur et espacées de $2.5\mu\text{m}$ (figure IV.1.a). L'intérêt de cette structure est que les matériaux sont mécaniquement stables et ont un comportement élastique dans la plage de température du procédé ($T < 400^\circ\text{C}$). Ces conditions répondent aux hypothèses d'application du modèle de Hu. La prise en compte des contraintes intrinsèques des lignes de W est primordiale pour cette comparaison. Des mesures par Rayons X ont permis de mesurer l'amplitude de ces contraintes dans le film non gravé et dans la ligne (i.e., après gravure) [8]: $\sigma_{\text{int}}^{(\text{film})} = 1300 \text{ MPa}$ et $\sigma_{\text{int}}^{(\text{ligne})} = 269 \text{ MPa}$.

Pour valider quantitativement les approches analytiques et numériques, des mesures par spectroscopie Raman ont également été réalisées sur les premières lignes du réseau. Le motif qui a servi pour ces mesures est illustré par la géométrie issue du calcul numérique 2D (figure IV.1.b), où est représenté également le champ de contraintes latérales σ_{xx} . On constate clairement que les contraintes en tension du W sont fortement relaxées aux bords des lignes et qu'elles sont maximales en leurs centres.

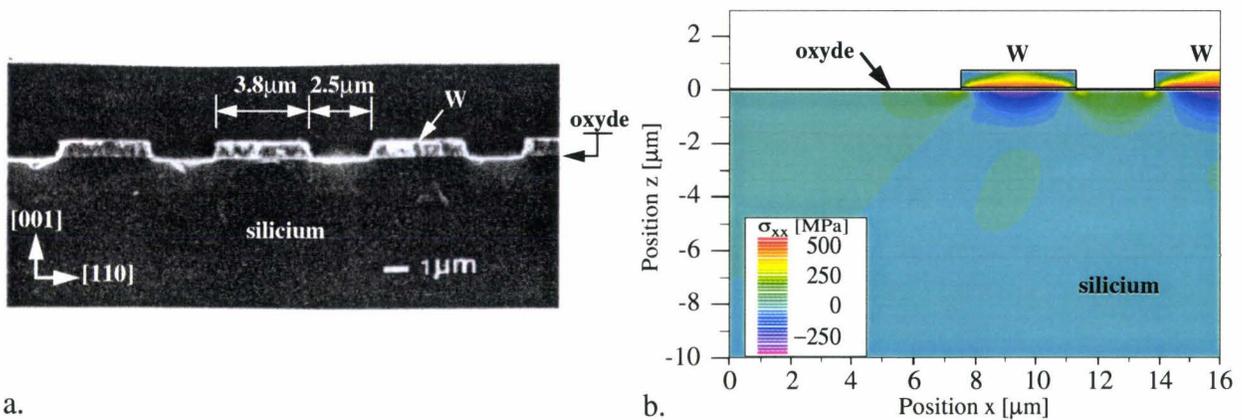


Figure IV.1: Photo MEB du réseau de lignes [8] (a), et motif étudiée (b).

Le calcul numérique prend en compte les principales sources de contraintes: la contrainte intrinsèque du W déposé à 400°C et les rampes thermiques. La contrainte intrinsèque du film étant mesurée à température ambiante (i.e., après refroidissement de 400°C à 25°C), la valeur appliquée dans le modèle, à la température de dépôt, doit prendre en compte cette composante thermique voisine de $+240 \text{ MPa}$. La contrainte intrinsèque effective du film de W à 400°C est donc de $+1060 \text{ MPa}$.

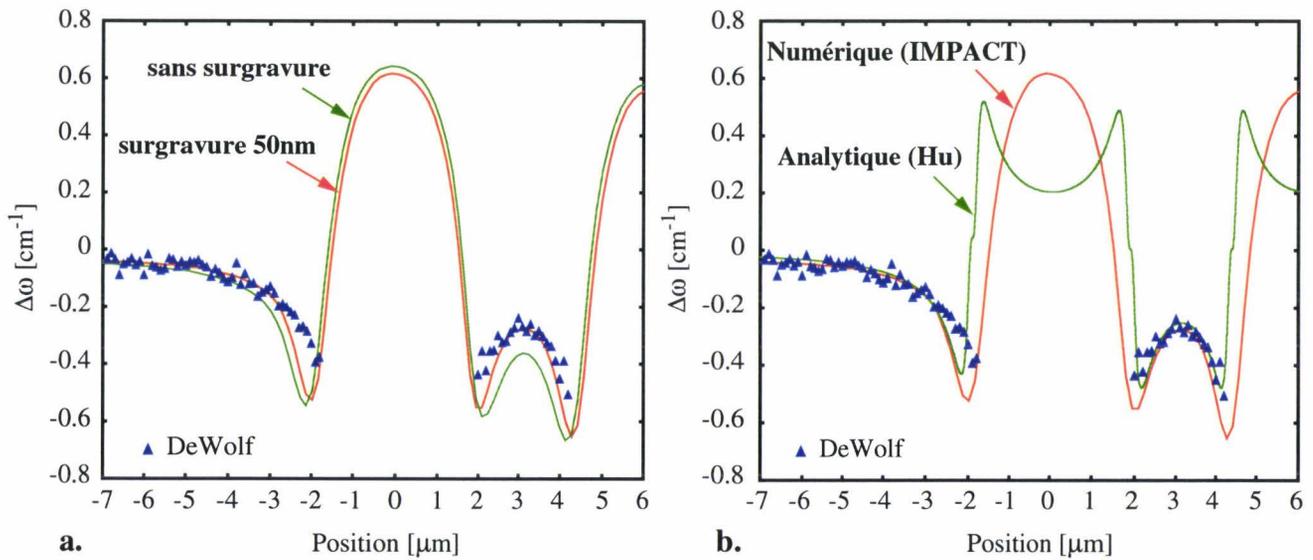


Figure IV.2: Comparaison des modèles analytiques et numériques avec les mesures micro-Raman [8]; effet de la surgravure d'oxyde (a), comparaison complète (b).

La confrontation des résultats du calcul numérique avec les mesures micro-Raman est représentée à la figure IV.2.a. Notons que le laser ne peut traverser les métaux réfractaires comme le W, et cela explique pourquoi aucune mesure n'est représenté sous les lignes. De plus, en approchant des bords d'une ligne, le faisceau se réfléchit partiellement sur cette ligne et affecte la mesure. Un facteur correctif empirique est fixé pour prendre en considération cet effet [8]. Cette correction peut être une des raisons pour laquelle on observe un certain désaccord entre le calcul et la mesure près des lignes. Par ailleurs, la prise en compte d'une probable surgravure de l'oxyde lors de la gravure du film de W permet d'obtenir un excellent accord entre les lignes [14].

A la figure IV.2.b, le calcul numérique est comparé au modèle analytique de la "force locale" en injectant la contrainte moyenne de la ligne ($\sigma_{\text{int}}^{(\text{ligne})} = +269$ MPa) dans l'équation (IV.1). Contrairement au calcul numérique où l'on exploite le tenseur complet des contraintes (cf. §III.3.3), la déviation Raman est calculée ici en affectant un simple facteur de proportionnalité à la contrainte latérale ($\Delta\omega = -1.93 \times 10^{-9} \cdot \sigma_{xx}$ [Pa]) [8]. Le meilleur accord avec les mesures est obtenu en évaluant cette contrainte analytique à une profondeur de $0.15 \mu\text{m}$, correspondant à la moitié de la profondeur de pénétration du laser. Par contre, on peut constater que le modèle de "force locale" ne prédit pas de maximum de contraintes au milieu des lignes. Cette limitation bien connue de ce modèle dans le cas de motifs étroits est corrigée si l'on applique le modèle de "la force distribuée" [8].

La modélisation analytique est généralement moins coûteuse en termes d'efforts de développement et de temps de calcul qu'une modélisation par éléments finis. Même si il est possible d'ajuster certains paramètres pour obtenir localement un bon accord avec les mesures, cet exemple prouve les limites de l'approche analytique pour reproduire certains effets, automatiquement pris en compte par une approche numérique (ex: "fusion" des pics de contraintes des bords de lignes étroites).

IV.2 Implantation numérique des comportements rhéologiques

Dans ce paragraphe, nous décrivons les détails numériques du calcul mécanique implantés dans nos simulateurs. Les modèles sont strictement identiques, quelle que soit la dimension. Dans un premier temps, nous présentons d'un point de vue général le cœur du calcul mécanique. Nous exposons ensuite les stratégies élaborées pour le traitement spécifique des lois de comportement non-linéaires que sont la viscoélasticité et l'élastoplasticité.

IV.2.1 Calcul mécanique général

Le calcul des structures par éléments finis que nous présentons est basé sur la méthode des déplacements. Autrement dit, ce sont les déplacements relatifs de chaque nœuds de la structure qui permettent de connaître l'état de contrainte et de déformation sur l'ensemble du domaine d'étude.

Considérons dans un premier temps le comportement élastique linéaire le plus général. La relation entre contraintes et déformations est linéaire et peut être mise sous la forme:

$$\{\sigma\} = [D](\{\varepsilon\} - \{\varepsilon_0\}) + \{\sigma_0\} \quad (IV.11)$$

où $[D]$ est une matrice d'élasticité où entrent les propriétés rhéologiques du matériau; $\{\sigma_0\}$ et $\{\varepsilon_0\}$ représentent les contraintes et déformations initiales, respectivement.

Les nouvelles sollicitations appliquées à la structure peuvent être introduites *a priori* soit sous forme de contraintes initiales, soit sous forme de déformations initiales. Les différentes charges que nous modélisons dans notre étude peuvent toujours se mettre sous la forme de déformations initiales. A noter que l'on utilise fréquemment le terme de "pré-déformations" pour les qualifier. Les contraintes générées par ces sollicitations sont directement proportionnelles à la différence entre les déformations réelles ($\{\varepsilon\}$) et initiales ($\{\varepsilon_0\}$).

Il en résulte que les contraintes initiales $\{\sigma_0\}$ ne représentent plus alors que les contraintes résiduelles en début de pas de temps. Comme ces contraintes résiduelles forment *a priori* un système en équilibre, les forces résultantes sont identiquement nulles après assemblage [15]. On omet donc fréquemment d'évaluer ces forces lors de la résolution des équations d'équilibre. La seule exception à cette règle est le cas d'une gravure de matériau où le fait d'enlever de la matière donnera naissance à des forces non compensées. Dans ce cas, il sera nécessaire de tenir compte des contraintes résiduelles présentes avant l'étape de gravure.

Par ailleurs, nous avons vu au chapitre II qu'il pouvait exister fondamentalement deux types de non-linéarités:

- les non-linéarités des *lois de comportement* où les relations contraintes-déformations ne sont plus linéaires (ex.: viscoélasticité, élastoplasticité).
- les non-linéarités *géométriques* où les relations entre déformations et déplacements ne sont plus linéaires (ex.: problèmes à grandes déformations).

Le premier type de non-linéarité peut être traité simplement en se ramenant à un problème équivalent d'élasticité. Ceci est possible à partir du moment où l'on aborde le problème non-linéaire de manière incrémentale, par petits incréments de charges. En effet, il suffit de remplacer dans l'équation (IV.11) la matrice d'élasticité $[D]$ par une matrice d'élasticité effective $[D^*]$, tangente de la courbe $\{\sigma\} = f(\{\varepsilon\})$. Le fait de ramener la résolution d'un problème non-linéaire à un problème d'élasticité équivalent est d'ailleurs justifié par Zienkiewicz [15]: "Si l'on peut aboutir à la solution d'un problème linéaire par un procédé itératif quelconque au terme duquel les constantes du matériau sont ajustées de telle sorte que la nouvelle loi de comportement soit vérifiée, cette solution est alors une solution du problème non linéaire".

Quant au second type de non-linéarité, il est nécessaire de procéder à une réorganisation plus en profondeur de la formulation. A partir de l'algorithme élaboré par Rodriguez-Ferran [16], le traitement de ces non-linéarités a été étudié. Néanmoins, on s'aperçoit que la prise en compte des grandes déformations est un effet du second ordre. Nous ne considérons donc pas ce type de non-linéarité dans la suite de ce travail.

L'algorithme général du calcul mécanique est décrit à la figure IV.3. A chaque pas de temps, les nouvelles sollicitations (pré-déformations) sont évaluées et converties en pré-contraintes. On ajoute si nécessaire les contraintes résiduelles au début du pas de temps. La résolution du problème mécanique est l'étape suivante.

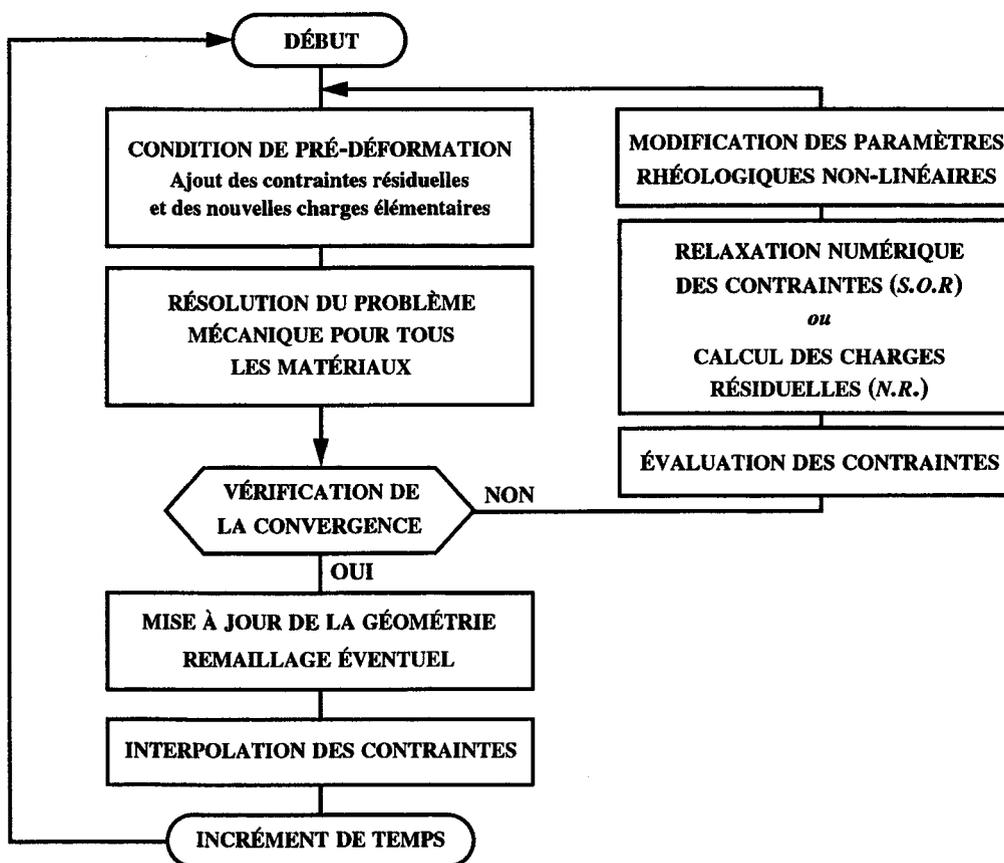


Figure IV.3: Algorithme du calcul mécanique complet (i.e., avec traitement des non-linéarités).

A la figure IV.3, la boucle itérative est utilisée pour le traitement des non-linéarités. Après l'évaluation des contraintes obtenues par la résolution de l'équilibre mécanique, deux techniques très différentes peuvent être mises en œuvre pour traiter ces itérations non-linéaires: la méthode de relaxation numérique des contraintes (S.O.R., *Successive Over Relaxation*) et la méthode de Newton-Raphson (N.R.). Toutes deux ont pour objectif premier d'ajuster les matrices d'élasticité effective $[D^*]$, ainsi que les différents paramètres rhéologiques, de manière à respecter les équations constitutives de chaque matériau. Dans le cas du traitement de la viscoélasticité non-linéaire (i.e., viscosité du matériau fonction des contraintes), la méthode SOR a démontré sa supériorité sur la méthode NR, à la fois en stabilité et en vitesse de convergence [17,18]. Cependant, la méthode NR s'adapte mieux au traitement d'un problème comme l'élastoplasticité. Tous les travaux de recherche qui ont été menés ou sont menés actuellement sur le traitement numérique du comportement élastoplastique utilisent cette méthode comme cœur du calcul [19,20,21].

Il serait plus élégant d'adopter une stratégie commune pour le traitement de la viscoélasticité et de l'élastoplasticité (soit par une méthode SOR, soit par une méthode NR). Nous avons préféré dupliquer le travail pour bénéficier des points forts de ces méthodes.

Le système est considéré convergé lorsque les déplacements incrémentaux de l'ensemble des nœuds, d'une itération à l'autre, sont inférieurs à 1% du déplacement maximal.

Si la déformation de la structure est importante (ex.: croissance de LOCOS ou de siliciures), un remaillage complet est effectué à partir de la nouvelle enveloppe. Ceci fait appel à des techniques d'élimination de boucles, de suppression d'angles trop aigus et de régulation de la densité de points de discrétisation. En 2D, ces procédures font partie des possibilités de simulation des topographies multicouches offertes par IMPACT et dont les détails numériques sont largement explicités par Baccus [22]. En 3D, certains travaux relatifs au traitement des interfaces existes mais sont limités à des structures relativement simples [23,24]. Couplées à des algorithmes de suppression d'éléments trop déformés, ces techniques permettent de régler partiellement les problèmes liés à la dégradation des maillages [25].

Finalement, les contraintes et déformations calculées au cours du pas de temps sont ajoutées aux contraintes et déformations résiduelles présentes initialement, puis interpolées de l'ancien maillage sur le nouveau, s'il y a eu remaillage.

IV.2.2 Problèmes à loi de comportement non linéaire

Lors de la présentation des différents modèles rhéologiques au chapitre II, nous avons fait mention de l'intérêt de décomposer les tenseurs de contraintes et de déformations en une composante relative aux changements de volume (partie de dilatation) et une autre relative aux changements de forme (partie de déviation). En effet, les réponses aux essais caractéristiques ont révélé des comportements assez différents, suivant les cas, pour de nombreux matériaux: il en résulte que les comportements de type visqueux ou plastique se manifestent principalement lors d'essais en cisaillement (partie de déviation), tandis que les changements de volume purs répondent à un comportement élastique linéaire (partie de dilatation). La figure IV.4 représente

la modélisation unidimensionnelle des deux comportements complexes qui nous intéressent plus particulièrement: la viscoélasticité (modèle de Maxwell) et l'élastoplasticité (modèle de Saint-Venant). Dans les deux cas, l'association en parallèle d'un ressort, symbolisant l'élasticité linéaire, permet la sommation des contraintes de la partie de dilatation avec celles de déviation. L'extension de ces modèles unidimensionnels dans les trois directions de l'espace se fait naturellement.

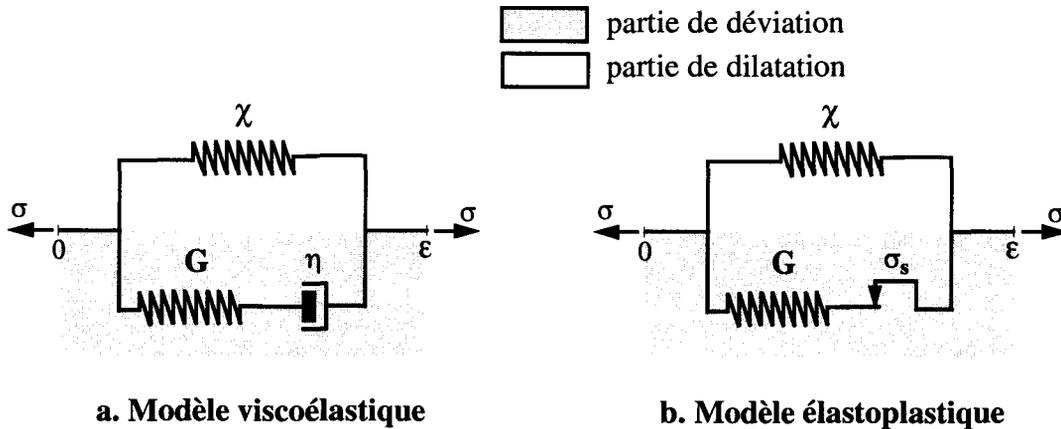


Figure IV.4: Modèle analogique unidimensionnel complet de la viscoélasticité (a) et de l'élastoplasticité (b).

Avant de dériver les équations constitutives des parties de dilatation et de déviation pour le cas des comportements complexes (viscoélasticité et élastoplasticité), nous considérons d'abord le cas d'un corps élastique et isotrope. Par application des définitions des tenseurs de dilatation et de déviation (cf. chapitre II), il est possible de décomposer l'équation de Hooke, régissant la relation contraintes/déformations de ce corps, de la manière suivante:

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \end{Bmatrix} = \left(\chi \times \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + G \times \begin{bmatrix} \frac{4}{3} & -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{3} & \frac{4}{3} & -\frac{2}{3} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{3} & -\frac{2}{3} & \frac{4}{3} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \cdot \begin{Bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{xy} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} \end{Bmatrix} \quad (IV.12)$$

avec χ et G , les modules de compressibilité et de rigidité, qui s'expriment en fonction du module d'Young E et du coefficient de Poisson ν selon les relations:

$$\chi = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (IV.13)$$

Ainsi, le premier terme dans le membre droit de l'équation (IV.12) correspond à la composante de dilatation du tenseur des contraintes, le second correspond au déviateur. Quel

que soit le comportement rhéologique (élastique linéaire, viscoélastique ou élastoplastique), le premier terme sera identique. Seul le second terme sera traité de manière différente pour les trois cas.

IV.2.2.1 Viscoélasticité

De nombreux matériaux employés pour la fabrication des circuits intégrés présentent des effets viscoélastiques qui se manifestent par un écoulement visqueux à haute température, alors que, à basse température, le comportement est de type élastique. Les matériaux qui répondent à ces caractéristiques sont, entre autres, les oxydes et les nitrures.

L'implémentation numérique du comportement viscoélastique (linéaire ou non) ayant déjà fait l'objet de travaux antérieurs, nous ne rappelons que les points importants de ce modèle [26,27].

Comme illustré à la figure IV.4.a, l'effet viscoélastique est introduit dans l'expression du déviateur des contraintes en utilisant l'élément de Maxwell, qui vérifie l'équation suivante:

$$\dot{\varepsilon}^s - \left(\frac{\dot{\sigma}^s}{G} + \frac{\sigma^s}{\eta} \right) = 0 \quad (\text{IV.14})$$

où η est la viscosité et G le module de rigidité du corps.

Nous allons résoudre cette équation (IV.14) dans le cas où nous imposons une vitesse de déformation constante ($\dot{\varepsilon} = \text{cste}$) à l'échantillon. Ceci est une approximation valide dans des intervalles de temps ΔT suffisamment petits [28]. Nous décomposons donc le temps en intervalles tels que $t_{n+1} - t_n = \Delta t$ pendant lesquels nous effectuons l'intégration. Alors $\dot{\varepsilon} = [\varepsilon(t_{n+1}) - \varepsilon(t_n)] / [t_{n+1} - t_n]$.

La résolution de (IV.14) donne:

$$\sigma^s(t_{n+1}) = \sigma^s(t_n) \cdot \exp\left(-\frac{t_{n+1} - t_n}{\tau_R(t_n)}\right) + \int_{t_n}^{t_{n+1}} G \cdot \dot{\varepsilon}^s \cdot \exp\left(-\frac{t_n - \tau}{\tau_R(t_n)}\right) d\tau \quad (\text{IV.15})$$

avec $\tau_R(t_n) = \eta(t_n)/G$, la constante de temps de relaxation caractéristique ($\tau_R(t_n)$ est constante dans l'intervalle de temps $[t_n, t_{n+1}]$); $\sigma^s(t_n)$ est la pré-contrainte existante au temps t_n (partie déviateur). Notons également que l'association en parallèle des éléments analogique du modèle permet d'écrire: $\varepsilon = \varepsilon^v = \varepsilon^s$.

L'équation (IV.15) devient alors:

$$\sigma^s(t_{n+1}) = \sigma^s(t_n) \cdot \exp\left(-\frac{t_{n+1} - t_n}{\tau_R(t_n)}\right) + G \frac{\varepsilon(t_{n+1}) - \varepsilon(t_n)}{(t_{n+1} - t_n)} \int_{t_n}^{t_{n+1}} \exp\left(-\frac{t_n - \tau}{\tau_R(t_n)}\right) d\tau \quad (\text{IV.16})$$

$$\sigma^s(t_{n+1}) = \sigma^s(t_n) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_R(t_n)}\right) + G \frac{\Delta \varepsilon}{\Delta t} \tau_R(t_n) \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_R(t_n)}\right)\right) \quad (\text{IV.17})$$

$$\sigma^s(t_{n+1}) = \sigma^s(t_n) \cdot \exp\left(-\frac{t_{n+1} - t_n}{\tau_R(t_n)}\right) + G_{\text{eff}}\Delta\varepsilon \quad (\text{IV.18})$$

avec

$$G_{\text{eff}} = G \cdot \frac{\tau_R(t_n)}{\Delta t} \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_R(t_n)}\right)\right) \quad (\text{IV.19})$$

Le premier terme du membre de droite de l'équation (IV.18) 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 $\exp(-\Delta t/\tau_R(t_n))$.

Le deuxième terme du membre de droite de l'équation (IV.18) exprime la contrainte induite par l'élément de déformation imposé dans le pas de temps Δt considéré. Cette contrainte est linéairement dépendante de la déformation avec l'hypothèse formulée ci-dessus (Δt 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 effective $[\mathbf{D}^*]$.

Cette dernière relation montre donc bien que la viscoélasticité introduite par le modèle de Maxwell peut être modélisée par une rigidité effective, G_{eff} , dans le terme de déviation des contraintes. Le formalisme développé dans le paragraphe précédent peut donc être facilement appliqué.

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

$$G_{\text{eff}} \approx \frac{\eta(t_n)}{\Delta t} \cdot \left(1 - \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_R(t_n)}\right)\right) = \frac{\eta(t_n)}{\tau_R(t_n)} = G \quad (\text{IV.20})$$

On retrouve le comportement purement élastique.

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

$$G_{\text{eff}} \approx \frac{G\tau_R(t_n)}{\Delta t} = \frac{\eta(t_n)}{\Delta t} < G \quad (\text{IV.21})$$

Or, comme le module de compressibilité χ est du même ordre de grandeur que G , la relation (IV.21) indique que le rapport G_{eff}/χ tend vers zéro, ce qui, dans le formalisme de l'élasticité se traduit par une condition d'incompressibilité ($\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} = 0$). On retrouve ainsi le régime visqueux incompressible.

Cette formulation de la viscoélasticité permet donc d'obtenir une modélisation continue du comportement 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.

La non-linéarité du comportement viscoélastique impose une actualisation à chaque pas de temps de l'histoire des contraintes. L'expression des contraintes à la fin d'un pas de temps (n) est donné par la somme:

- 1- des contraintes générées durant la pas de temps courant, dues à la déformation calculée (ϵ).
- 2- du résidu de contraintes des (n-1) étapes précédentes.

Ceci correspond à l'équation (IV.22) pour la composante de dilatation et à l'équation (IV.23) pour la partie de déviation:

$$\sigma_n^v = \chi \cdot \epsilon_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i^v \quad (\text{IV.22})$$

$$\sigma_n^s = G_{\text{eff}} \cdot \epsilon_n + \sum_{i=1}^{n-1} \sigma_i^s \cdot e^{-i\left(\frac{\Delta t}{\tau_R}\right)} \quad (\text{IV.23})$$

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

Suivant l'approche de Eyring, nous considérons une dépendance en contraintes de la viscosité du matériau viscoélastique (équation (II.36)). Cette non-linéarité doit être traitée par un processus itératif apparaissant dans l'algorithme général (figure IV.3). Pour cela, l'utilisation d'une technique auto-consistante de sous-relaxation numérique (SOR) assure la convergence globale du calcul [26]. Dans notre cas, cette procédure de relaxation est définie pour la contrainte de cisaillement maximale locale σ_{max} du matériau viscoélastique:

$$\sigma_{\text{max}}^{(k)} = (1 - \omega) \cdot \sigma_{\text{max}}^{(k-1)} + \omega \cdot \sigma_{\text{max}}^{(k)} \quad (\text{IV.24})$$

où ω représente le facteur de relaxation, et k le compteur de boucles. Le choix du coefficient ω est primordial. En effet, des valeurs importantes ($\omega = 0.3$) aboutissent souvent à une divergence du système. Des valeurs très faibles ($\omega = 10^{-3}$) permettent d'obtenir une convergence, mais nécessite un nombre d'itérations trop important. C'est pourquoi nous préconisons de modifier dynamiquement les valeurs de ω selon la qualité de la convergence du système. D'une valeur initiale arbitrairement fixée à 0.3 en début de pas de temps, ω évolue empiriquement selon l'expression:

$$\omega = 0.3 \times 0.7^j \quad (\text{IV.25})$$

où j est un entier incrémenté de 1 lorsque l'écart de contraintes de cisaillement $\Delta\sigma_{\text{max}}^{(k)}$ entre deux boucles consécutives (k-1) et (k) augmentent. Cet écart est défini comme étant la variation maximale de contrainte sur tous les éléments du matériau:

$$\Delta\sigma_{\text{max}}^{(k)} = \max_{\text{elements}} \left| \sigma_{\text{max}}^{(k)} - \sigma_{\text{max}}^{(k-1)} \right| \quad (\text{IV.26})$$

Notons que cette technique de relaxation numérique reste applicable pour traiter simultanément plusieurs paramètres, directement calculés à partir des inconnues du problème (i.e., déplacements) et entrant dans la définition de coefficients non-linéaires. C'est notamment le cas de la cinétique d'oxydation du silicium qui fait intervenir l'état de contraintes hydrostatiques dans la diffusivité des agents oxydants dans la silice en croissance, ainsi que la contrainte normale à l'interface oxyde/silicium pour moduler le taux de réaction. Des études approfondies sur le sujet ont démontré que l'ajout de ces deux paramètres non-linéaires supplémentaires, traités de manière analogue à la viscosité non-linéaire, n'est en rien préjudiciable à la stabilité numérique de la méthode SOR [26]. Il est à noter également que, contrairement à d'autres travaux [29,30], aucune technique particulière n'a du être implantée pour traiter le cas des comportements quasi-incompressibles qui apparaissent lorsque la viscosité devient très faible.

IV.2.2.2 Elastoplasticité

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 par éléments finis du comportement plastique. Ainsi, Zienkiewicz a proposé une formulation générale de la matrice élastoplastique, permettant de calculer l'évolution des contraintes plastiques, selon différents critères (Von Mises, Coulomb-Drucker) [20].

La méthode de Zienkiewicz se base sur la résolution d'un problème d'*élasticité incrémentale* au cours de laquelle la relation contrainte-déformation est ajustée à chaque pas de temps en fonction de la déformation plastique. Même si le traitement des non-linéarités de cette méthode repose sur un schéma itératif de type Newton-Raphson (NR), très différent de la technique SOR de la viscoélasticité, il n'en reste pas moins que la procédure reste compatible avec l'algorithme mécanique général (figure IV.3). En effet, le principe d'extraction d'une matrice d'élasticité effective est similaire à la stratégie adoptée pour la viscoélasticité. Le cœur du traitement de l'élastoplasticité qui a été développé pour ce travail repose donc en grande partie sur le modèle de Zienkiewicz, en nous limitant au cas du comportement élastique parfaitement plastique [20]. Néanmoins, des travaux plus récents, et notamment ceux de Simo et Taylor, ont démontré que certaines précautions doivent être prise pour préserver la convergence asymptotique quadratique caractéristique des méthodes d'intégration de type Newton [19]. Nous allons à présent décrire les différents points de l'algorithme du traitement élastoplastique implanté, basé pour l'essentiel sur l'approche de Zienkiewicz, mais incluant également les améliorations du modèle de Simo et Taylor.

Le traitement de l'élastoplasticité effectué pour ce travail est schématisé à la figure IV.5. Les différentes étapes du traitement non-linéaire de ce problème, pour un incrément de charge donné, se déroule de la manière suivante:

1. A partir de l'état courant de contraintes σ_0 , on applique le nouvel incrément de charge et l'on calcule les incréments *élastiques* de contraintes et de déformations correspondants.

2. On ajoute l'incrément de contrainte calculé à la contrainte initiale σ_0 pour obtenir σ_1' et on évalue $F(\{\sigma_1'\})$. F correspond à la fonction qui détermine la limite d'élasticité et qui est donnée à l'équation (II.38). Si $F(\{\sigma_1'\}) < 0$, seules des variations de déformations élastiques sont engendrées et le processus s'arrête, sinon on passe à l'étape 3.
3. Pour respecter la condition de consistance ($F=0$), les contraintes dépassant la limite d'élasticité sont projetées selon le chemin le plus court (*closest-point-projection*) sur la surface de la limite d'élasticité (σ_1). Cette étape porte le nom de *return mapping* [19]. Bien que très simple à mettre en œuvre dans le cas d'un modèle de plasticité parfaite (i.e., sans écrouissage), cette procédure nécessite une boucle locale de Newton-Raphson dans le cas général.
4. Le module d'élasticité effective tangent est évalué à partir de σ_1 [19]. La variation de contrainte $\Delta\sigma_1$ nécessaire pour réaliser la projection sur la surface de la limite d'élasticité est alors convertie en force résiduelle non-équilibrée. Pour chaque élément fini du domaine entrant en plasticité, la force résiduelle s'écrit:

$$\{f\}_1^e = \int_e [B]^T \Delta\sigma_1 dS_e \tag{IV.27}$$

où $[B]$ représente la matrice classique de passage déformations-déplacements [15].

5. On résout l'équilibre mécanique de la structure en considérant le système de charges $\{f\}_1$ pour trouver le nouvel état de contrainte σ_2' .
6. On répète les étapes de 2 à 5, jusqu'à ce que les forces résiduelles et/ou les déplacements calculés soient inférieurs à une certaine limite.

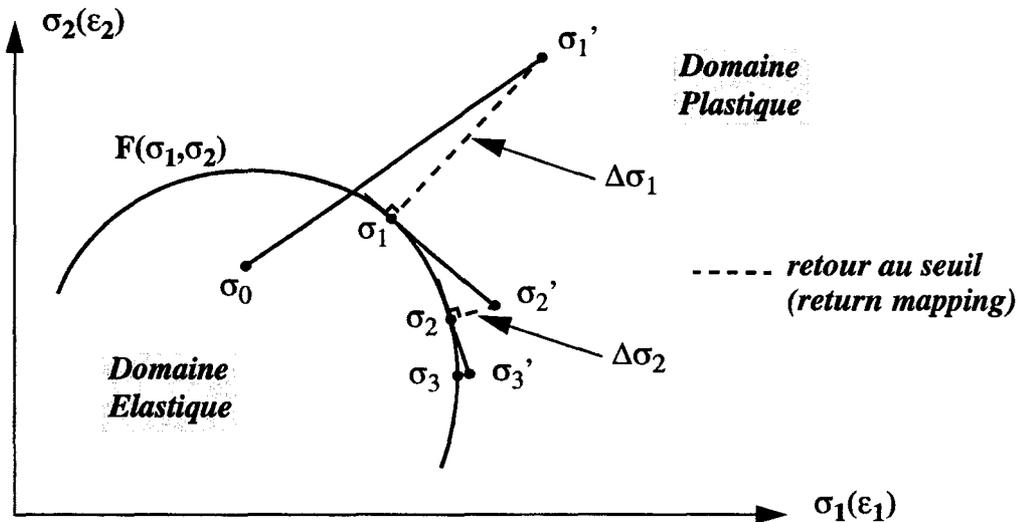


Figure IV.5: Interprétation graphique du traitement de l'élastoplasticité.

Dans la pratique, même en fixant un critère de convergence sévère sur les déplacements de 10^{-9} cm, cette procédure ne nécessite que très rarement plus d'une dizaine d'itérations non-linéaires pour converger.

IV.2.2.3 Couplage Viscoélasticité/Elastoplasticité

Bien que le comportement rhéologique le plus complet de la viscoélastoplasticité ne soit pas modélisé dans ce travail, on peut être amené à devoir résoudre des problèmes combinant à la fois des matériaux viscoélastiques et des matériaux élastoplastiques. Ayant adopté des traitements numériques sensiblement différents pour traiter ces non-linéarités, il convient de réaliser un découplage du calcul des deux types de problème.

L'approche initialement élaborée pour ce découplage est illustré à la figure IV.6. Dans un premier temps, on résout le problème viscoélastique (boucle non-linéaire SOR) pour lequel les matériaux élastoplastiques sont traités comme purement élastiques. Si la limite d'élasticité est atteinte pour ces derniers, on procède alors au traitement élastoplastique (boucle non-linéaire NR). Lors de ce calcul, aucun traitement des non-linéarités viscoélastiques n'est effectué (i.e., les matériaux viscoélastiques conservent leurs propriétés rhéologiques calculées à la boucle SOR). Si la contrainte de cisaillement maximum σ_{\max} de chaque matériau viscoélastique est modifiée de plus de 1% après la boucle NR, on retourne au problème viscoélastique en utilisant cette nouvelle contrainte de cisaillement pour réinitialiser le modèle d'Eyring (équation (II.36)).

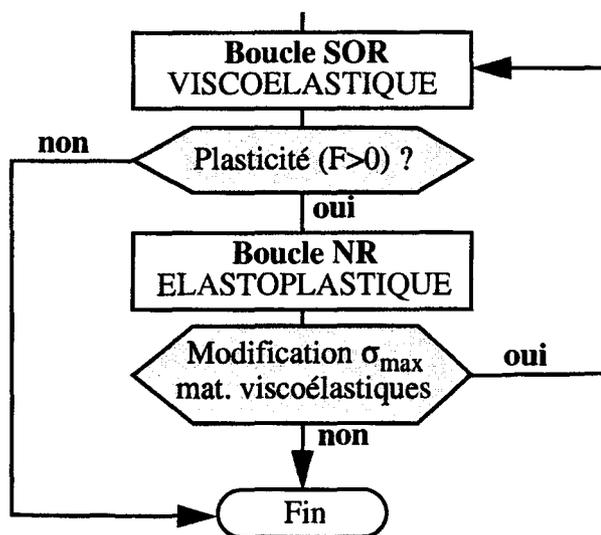


Figure IV.6: Traitement découplé de l'élastoplasticité et de la viscoélasticité.

Pour évaluer les performances de cette stratégie, la simulation d'une structure simple mettant en œuvre à la fois des phénomènes viscoélastiques et élastoplastiques est considérée (encart figure IV.7): une ligne d'alliage aluminium-cuivre (élastoplastique) est réalisée sur un substrat recouvert d'un film d'oxyde (viscoélastique). On considère la montée en température de cette structure de 25°C jusqu'à 1200°C: notons que cette étape n'est que purement illustrative puisque la température de fusion de l'aluminium est d'environ 660°C ! Mais ce chauffage fictif permet d'activer les phénomènes plastiques de l'aluminium (dès ~100°C) et les phénomènes visqueux de l'oxyde (au-delà d'environ 800°C). L'évolution des contraintes internes du film d'oxyde et de la ligne d'aluminium est représentée à la figure IV.7.a.

Le premier résultat important révélé par cette étude est qu'aucun rebouclage sur le problème viscoélastique n'a été observé, et ce quel que soit la température: la variation maximale de la contrainte σ_{\max} induite par la boucle NR atteint au plus 0.6MPa à 1100°C.

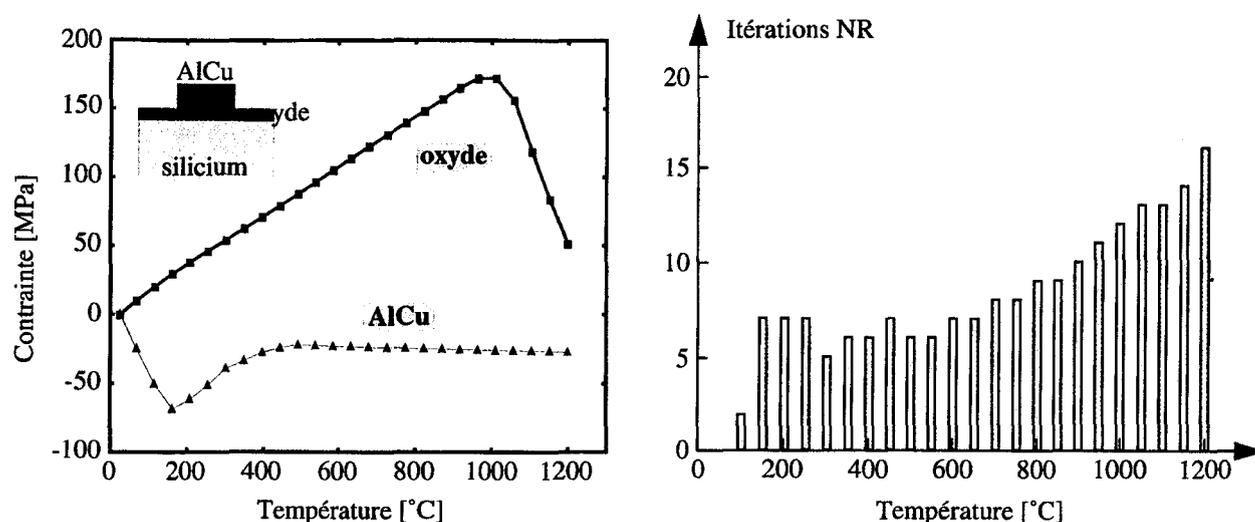


Figure IV.7: Evaluation de l'approche numérique incluant les deux algorithmes de traitement des non-linéarités.

Concernant l'évolution des contraintes des matériaux, une variation linéaire en température traduit un comportement élastique: on constate donc que pour l'aluminium, la plage élastique correspond aux faibles températures ($\leq 100^\circ\text{C}$). Ceci est confirmé par l'histogramme des itérations de boucle NR (figure IV.7.b). Dans la gamme $[100^\circ\text{C}-900^\circ\text{C}]$, l'oxyde est quasiment élastique et les phénomènes de plasticité de l'aluminium se stabilisent: le nombre d'itérations non-linéaires reste à peu près constant ($\sim 7-8$). Pour les plus hautes températures, la relaxation visqueuse de l'oxyde dégrade légèrement la vitesse de convergence du problème élastoplastique, mais la stabilité de l'algorithme est préservée.

En conclusion, nous venons de démontrer qu'une approche découplée des traitements viscoélastiques et élastoplastiques autorise l'utilisation de différentes stratégies pour le calcul des non-linéarités. Ceci est d'autant plus justifié que le traitement élastoplastique n'affecte quasiment pas les résultats obtenus par le traitement viscoélastique. D'autres travaux ont tenté d'intégrer un modèle complet de viscoélastoplasticité pour traiter ces différents effets simultanément, dans le cas de l'oxydation du silicium [31]. Néanmoins, des problèmes de temps de calcul excessifs, et surtout d'oscillations numériques, semblent constituer un sérieux obstacle à l'utilisation de ce modèle complexe.

IV.3 Modélisation des sources de contraintes mécaniques

Nous avons présenté au paragraphe IV.2.1 le cœur du calcul éléments finis commun aux différentes sources de contraintes mécaniques. Le travail de modélisation s'articule autour de deux points essentiels: le premier concerne la définition des sollicitations, soit sous forme d'une pré-déformation $\{\epsilon_0\}$, soit sous forme d'une pré-contrainte $\{\sigma_0\}$ (équation (IV.11)); le second point est relatif à l'établissement des lois constitutives des matériaux, déterminant la réponse aux sollicitations.

IV.3.1 Modèles existants

Une certaine quantité de travail relative à la modélisation des contraintes a déjà été effectuée dans l'équipe [26,27]. Dans ce paragraphe, nous faisons un rappel des traitements numériques des deux sources de contraintes déjà existantes: les sources thermiques et intrinsèques.

IV.3.1.1 Contrainte thermique

Lors d'une variation thermique, la déformation potentielle $\varepsilon^0(T)$ du film par rapport au substrat est fonction de leur différence de coefficients de dilatation thermique:

$$\varepsilon^0(T) = \int_{T_0}^T [\alpha_f(T) - \alpha_s(T)]dT \quad (IV.28)$$

où $\alpha_f(T)$ et $\alpha_s(T)$ sont les coefficients de dilatation du film et du substrat, respectivement; T est la température du système, et T_0 est la température initiale.

En faisant les hypothèses que:

- i) les coefficients de dilatation thermique sont indépendants de la température,
- ii) il n'existe pas de gradient de température dans les matériaux,
- iii) le film est homogène et isotrope, la relation (IV.28) devient:

$$\varepsilon^0(T) = (\alpha_f - \alpha_s)(T - T_0) \quad (IV.29)$$

Dans la pratique, l'épaisseur du film est toujours beaucoup plus petite que celle du substrat. Comme l'interface film/substrat peut être considérée comme parfaitement rigide, les déformations relatives du film par rapport au substrat seront négligeables, le long de cette interface. Le système correspond alors à un état de contraintes planes (cf. §II.4.2). Si l'on associe les directions (x,y) pour le plan de l'interface, toutes les composantes qui lui sont normales (i.e., en z) seront nulles. Par ailleurs, l'isotropie du film permet de définir une distribution biaxiale des contraintes, et l'on peut mettre le tenseur des contraintes du film sous la forme:

$$[\sigma_f] = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{E_f}{1-\nu_f} \varepsilon_b & 0 & 0 \\ 0 & \frac{E_f}{1-\nu_f} \varepsilon_b & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (IV.30)$$

où $E_f/(1-\nu_f)$ est le module biaxial du film, et ε_b représente la déformation biaxiale effective du film. Cette déformation est l'écart entre la déformation biaxiale réelle (annulée par la rigidité du substrat) et la déformation potentielle ε^0 :

$$\varepsilon_b(T) = \varepsilon(T) - \varepsilon^0(T) = (\alpha_s - \alpha_f)(T - T_0) \quad (IV.31)$$

En combinant les équations (IV.30) et (IV.31), on retrouve la formulation classique de la contrainte thermique:

$$\sigma_f(T) = \frac{E_f}{1 - \nu_f} (\alpha_s - \alpha_f) (T - T_0) \quad (\text{IV.32})$$

D'un point de vue numérique, pour un matériau et une variation de température ΔT donnés, on applique à tous les éléments finis de ce matériau une même sollicitation en déformation $\{\varepsilon_0^{\text{th}}\}$, élastique, isotrope, et proportionnelle à son coefficient de dilatation thermique α :

$$\{\varepsilon_0^{\text{th}}\} = \begin{Bmatrix} 0 \\ \varepsilon_{xx} \\ 0 \\ \varepsilon_{yy} \\ 0 \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{xy}^0 \\ 2\varepsilon_{yz}^0 \\ 2\varepsilon_{xz}^0 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \alpha \cdot \Delta T \\ \alpha \cdot \Delta T \\ \alpha \cdot \Delta T \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (\text{IV.33})$$

Dans le cas bidimensionnel et en considérant l'hypothèse des déformations planes, un terme correctif doit être rajouté, car cette hypothèse n'interdit pas les contraintes perpendiculairement au plan de simulation [15]. Ce terme s'obtient en développant à nouveau les équations des composantes de contraintes et appliquant la condition de déformations planes (i.e., $\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = 0$). L'équation (IV.33) devient alors:

$$\{\varepsilon_0^{\text{th}}\} = \begin{Bmatrix} 0 \\ \varepsilon_{xx} \\ 0 \\ \varepsilon_{yy} \\ 2\varepsilon_{xy}^0 \end{Bmatrix} = (1 + \nu) \begin{Bmatrix} \alpha \cdot \Delta T \\ \alpha \cdot \Delta T \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (\text{IV.34})$$

où ν est le coefficient de Poisson du matériau considéré.

Lors du calcul numérique, ces pré-déformations $\{\varepsilon_0^{\text{th}}\}$ sont converties en pré-contraintes $\{\sigma_0^{\text{th}}\}$ en tenant compte des possibles propriétés non-élastiques des matériaux:

$$\{\sigma_0^{\text{th}}\} = [D^*] \{\varepsilon_0^{\text{th}}\} \quad (\text{IV.35})$$

où $[D^*]$ représente la matrice d'élasticité effective du matériau au moment du calcul de la sollicitation thermique.

IV.3.1.2 Contrainte intrinsèque

Le nombre de paramètres de procédé affectant le niveau des contraintes intrinsèques des films étant très important, il semble illusoire d'espérer établir une loi permettant de calculer la sollicitation correspondante. Une approche empirique a été adoptée pour traiter cette source de contraintes.

La contrainte intrinsèque fait partie des paramètres élémentaires de caractérisation des films minces, et son extraction est facilement réalisable grâce à une mesure *in-situ* de déflexion de plaque d'un dépôt uniforme de test (équation de Stoney). De part la technique utilisée, la contrainte intrinsèque mesurée $\{\sigma_{int}\}$ correspond à la valeur moyenne de la contrainte biaxiale du film. Pour le calcul numérique, on applique à tous les éléments du film déposé une même pré-déformation $\{\varepsilon_0^{int}\}$, élastique et isotrope:

$$\{\varepsilon_0^{int}\} = \begin{Bmatrix} \varepsilon_{xx}^0 \\ \varepsilon_{yy}^0 \\ \varepsilon_{zz}^0 \\ 2\varepsilon_{xy}^0 \\ 2\varepsilon_{yz}^0 \\ 2\varepsilon_{xz}^0 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \frac{(1-\nu)}{E} \cdot \sigma_{int} \\ \frac{(1-\nu)}{E} \cdot \sigma_{int} \\ \frac{(1-\nu)}{E} \cdot \sigma_{int} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (IV.36)$$

où $E/(1-\nu)$ correspond au module biaxial du film déposé.

Le fait d'imposer une déformation isotrope n'est pas physiquement justifiée mais permet d'appliquer cette sollicitation qu'elle que soit la topographie réelle sur laquelle sera déposée le film. Rueda a établi, pour ce modèle, une formulation plus rigoureuse mais plus complexe, où il n'applique la pré-déformation que parallèlement à la topographie locale [32]. Cependant, l'erreur commise est minime. Prenons un exemple: si l'on considère le dépôt d'un film de nitrure uniforme sur la surface (x,y) d'un substrat, et dont la contrainte intrinsèque mesurée vaut $\sigma_{int} = +1\text{GPa}$. Le film n'étant pas contraint dans la direction z, la déformation calculée dans cette direction est l'inverse de la pré-déformation imposée. En considérant un module biaxial typique de 370GPa , la pré-déformation est donc de $\varepsilon_{zz}^0 = -2.7 \times 10^{-3}$. Autrement dit, on aboutit à une contraction artificielle négligeable de l'épaisseur de moins de 0.3%.

Comme pour la contrainte thermique, l'application de ce modèle en 2D nécessite de modifier les coefficients du tenseur de pré-déformations.

IV.3.2 Phénomènes extrinsèques

IV.3.2.1 Absorption/évaporation d'eau dans les oxydes

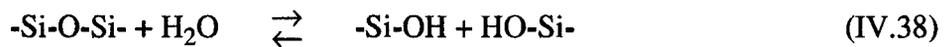
Le dopage des films d'oxyde, que ce soit en phosphore (PSG) ou en bore et phosphore (BPSG), est une technique encore fréquemment employée aujourd'hui. Elle permet de réduire sensiblement la température de transition vitreuse des oxydes, et en conséquence, elle permet la planarisation des topographies par fluage à des températures relativement basses. Cependant, la susceptibilité des oxydes à absorber l'humidité de l'air ambiant est directement proportionnelle au dopage. Ce phénomène peut avoir des conséquences sur les performances électriques des composants.

Le modèle, que nous présentons en 2D, s'articule en deux étapes pour chaque pas de temps [33]: d'abord on effectue le calcul de la diffusion de l'eau dans la structure, puis on évalue les changements de contraintes mécaniques en fonction de la quantité d'eau absorbée ou évaporée.

Pour la résolution de la diffusion de l'eau dans l'oxyde en contact avec l'air ambiant, on considère que le film est isotrope et homogène. La diffusion peut alors se mettre sous la forme d'une simple équation de Fick, dont l'expression 2D est:

$$D(T, \rho) \cdot \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (\text{IV.37})$$

où C est la concentration en eau (cm^{-3}) et $D(T, \rho)$ la diffusivité de l'eau dans le film (cm^2/s). Ce dernier paramètre est fonction de la température. Une dépendance en densité peut être introduite si des phénomènes de densification se manifestent (ex.: cas des oxydes pelliculés). Néanmoins, cette dépendance peut être négligée dans le cas des oxydes déposés par des techniques CVD [34]. Par ailleurs, uniquement les phénomènes d'absorption/évaporation d'eau sont modélisés, et non pas les processus complexes de ruptures/créations de liaisons covalentes avec libération/capture de radicaux OH:



Concernant les conditions aux limites, seul le flux à la surface libre du film est non-nul. Dans le cas d'une absorption d'eau, il prend la forme:

$$F = k \cdot (C^s - C^s) \quad (\text{IV.39})$$

et dans le cas d'une évaporation, ce flux devient:

$$F = -h(T) \cdot C^s \quad (\text{IV.40})$$

où C^s est la concentration inconnue à la surface libre (cm^{-3}), C^s est la concentration imposée par le taux d'humidité et le dopage du film (cm^{-3}) [35], et $h(T)$ est le coefficient d'évaporation

($\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$). Comme la valeur du coefficient de transport est généralement très grande ($\sim 10^{-6} \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$), l'équation (IV.39) représente une condition de Dirichlet: $CWS = C^s$.

A chaque pas de temps de la simulation, la variation de la dose totale en eau ΔQ du film exposé est évaluée. En 2D, avec l'hypothèse des déformations planes, cette variation de dose est associée à une variation de surface ΔS (positive pour une absorption et négative pour une évaporation):

$$\Delta S = \frac{\Delta Q}{\rho_{\text{H}_2\text{O}} \cdot \left(\frac{N_A}{M}\right)} \quad (\text{IV.41})$$

où $\rho_{\text{H}_2\text{O}}$ est la densité de l'eau ($\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$), N_A est la constante d'Avogadro (mol^{-1}), et M représente la masse moléculaire de l'eau ($\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$). Cette quantité peut alors être convertie en une sollicitation en déformation $\{\varepsilon_0^{\text{ext}}\}$ correspondant à la condition initiale du problème mécanique, exactement comme dans le cas des contraintes thermiques ou intrinsèques:

$$\{\varepsilon_0^{\text{ext}}\} = \begin{Bmatrix} 0 \\ \varepsilon_{xx} \\ 0 \\ \varepsilon_{yy} \\ 2\varepsilon_{xy} \\ 0 \end{Bmatrix} = (1 + \nu) \begin{Bmatrix} \frac{1}{3} \frac{\Delta S}{S} \\ \frac{1}{3} \frac{\Delta S}{S} \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (\text{IV.42})$$

avec ν le coefficient de Poisson du film exposé.

IV.3.2.2 Densification des oxydes

La topographie de surface du multicouche après chaque opération de photolithogravure couplée à l'augmentation du nombre de niveaux rend nécessaire une opération d'aplanissement. Comme on a pu le voir précédemment, une solution consiste à doper les oxydes de manière à diminuer plus rapidement leur viscosité et améliorer leur capacité de fluage à haute température (de 800°C à 1100°C). Mais cette solution a des limites: en effet, le recuit à des températures supérieures à $\sim 500^\circ\text{C}$ est impossible de part l'utilisation de l'aluminium comme matériau conducteur.

Une autre démarche consiste à utiliser un polymère déposé à la tournette. Par référence à son processus de dépôt, ce polymère est appelé SOG (*Spin-On-Glass*). Il peut être inorganique (silicate) ou organique (siloxane) comme cela est illustré à la figure IV.8. Parmi les oxydes SOG, de nombreuses recherches actuelles s'intéressent à ceux présentant une faible permittivité diélectrique, comme l'oxyde HSQ (*Hydrogen Silsesquioxane*). Comme une quantité importante d'atomes d'hydrogène reste dans le film après sa densification, sa permittivité peut être inférieure à 3 [36]. Néanmoins, des études approfondies du processus de densification de ce film montrent une instabilité en contrainte très importante au-delà de 300°C , liée au processus de déshydrogénation [37].

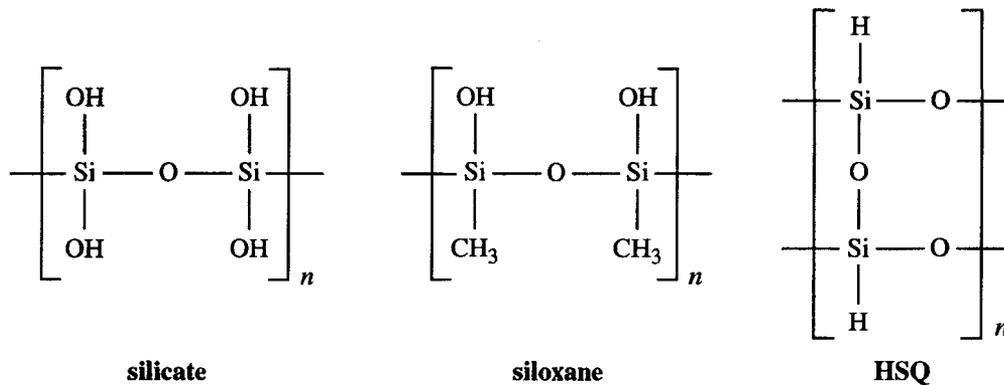


Figure IV.8: Structure des principaux oxydes de type SOG [36].

Un certain nombre de travaux se sont intéressés à la modélisation des phénomènes de densification de ce type de film. Parmi ceux-ci, les modèles développés par Bornside (éléments finis) [38] et Hirasawa (analytique) [39] présentent le grand intérêt de prendre en compte la force centrifuge lors du pelliculage du film. Par contre, il ne s'intéresse qu'à l'évolution topographique du film, et non pas aux contraintes engendrées. Scherer a analysé de manière approfondie le processus de densification des oxydes mais n'a pas considéré la contraction volumique du film et les changements de topographie associés [40]. Le modèle de densification proposée ici se base sur le modèle d'absorption/évaporation de l'eau. Les phénomènes inhérents au pelliculage (i.e., effets des forces centrifuges) ne sont pas considérés.

Pour notre étude, nous nous limitons à la modélisation de la densification du SOG silicate, car sa caractérisation complète a été effectuée lors de précédents travaux [41]. Cet oxyde est le P114A et sa composition chimique est donnée au tableau IV.1. Cette composition est celle du matériau avant dépôt (i.e., à l'état liquide). On constate que la masse totale de silicate ne représente que 5% de la masse totale, le reste étant constitué d'eau et de différents solvants.

Tableau IV.1: Composition du SOG silicate P114A.

Espèce chimique	fraction de masse [%]
éthanol	20
isopropanol	30
acétone	30
eau	15
polymère phosphosilicate	5

Lors des recuits de densification du film, la majeure partie des espèces solvantes est évaporée. On peut exprimer l'évolution de la densité du SOG lors de la densification sous la forme:

$$\rho(t) = m(t) \cdot \bar{\rho}_{\text{solvants}} + [1 - m(t)] \cdot \rho_{\text{SOG}} \quad (\text{IV.43})$$

où $m(t)$ est la fraction en masse de solvants, $\bar{\rho}_{\text{solvants}}$ la densité moyenne des solvants, et ρ_{SOG} la densité finale du film de SOG. La structure du film densifié doit théoriquement se rapprocher de celle des oxydes thermiques (i.e., $\rho_{\text{SOG}} \approx \rho_{\text{SiO}_2} = 2.2 \text{ g.cm}^{-3}$).

Il est alors possible d'appliquer le modèle d'absorption/évaporation d'eau pour modéliser le processus de densification du SOG [33]. Néanmoins, nous sommes amenés à faire une approximation: le modèle ne considère qu'une seule espèce diffusante dans le film, en l'occurrence l'eau. A partir de la composition chimique du SOG, et en connaissant sa densité initiale et finale, il est possible d'extraire une densité effective pour l'eau $\rho_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{eff}}$, moyenne sur l'ensemble des solvants [42]. En considérant de plus une distribution initiale uniforme dans le film, la concentration initiale C en eau est:

$$C_{(t=0)} = \frac{N_A}{M} \cdot \left[\frac{1}{\rho_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{eff}}} + \left(\frac{1 - m_{(t=0)}}{m_{(t=0)}} \right) \cdot \frac{1}{\rho_{\text{SOG}}} \right] \quad (\text{IV.44})$$

où M représente la masse moléculaire de l'eau (g.cm^{-3}) et N_A est la constante d'Avogadro (mol^{-1}). La procédure de résolution du problème de diffusion et d'équilibrage mécanique reste la même que pour le cas des oxydes CVD dopés.

Lors de l'absorption ou de l'évaporation d'eau pour les oxydes CVD, la structure physico-chimique des films n'est pas altérée. En témoigne la très faible variation de la densité [41]. Lors de la densification des oxydes SOG, les variations de densité sont souvent très significatives et influent sur les différentes propriétés rhéologiques du film. Scherer a d'ailleurs quantifié ce phénomène et établi des lois empiriques de dépendance en densité pour le module d'Young E , la viscosité η et la diffusivité D des espèces volatiles du film [40]:

$$E(\rho) = E_0 \cdot \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^n \quad (\text{IV.45})$$

$$\eta(\rho) = \eta_0 \cdot \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^n \quad (\text{IV.46})$$

$$D(\rho) = D_0 \cdot \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^n \quad (\text{IV.47})$$

où l'indice '0' fait référence au début de processus (i.e., après pelliculage mais avant densification); n est un paramètre intrinsèque au film qui détermine la vitesse d'évolution des paramètres pendant la densification.

Le modèle de densification qui vient d'être présenté peut être appliqué à d'autres films. Par exemple, les films riches en radicaux OH après dépôt, comme les oxydes LPCVD-TEOS, ont généralement besoin de recuit de densification pour les stabiliser mécaniquement. Les variations de contraintes et de densité sont suffisamment importantes pour que des modifications substantielles des propriétés mécaniques des films aient lieu [44].

IV.3.2.3 Cristallisation du silicium amorphe

Les changements de volume des matériaux lors de transition de phase peuvent constituer également des sources importantes de contraintes. Ceci est tout particulièrement mis en évidence par les variations brutales de contraintes ($\sim 1\text{GPa}$) lors de la cristallisation de films minces de silicium amorphe [43,45]. Miura a montré que la température de cristallisation du silicium amorphe est fonction de son dopage mais reste dans tous les cas très proche de 600°C (i.e., de 580°C pour un dopage en phosphore de $4 \times 10^{20}\text{cm}^{-3}$ à 630°C sans dopage [45]). Par contre, l'amplitude de la contraction du film est toujours très voisine de 0.6%, quel que soit le niveau de dopage. Cette contraction est essentiellement due à la nucléation des grains pour former le polycristal. La modélisation microscopique du phénomène de nucléation et de croissance des grains étant extrêmement complexe, une approche empirique a été adoptée. A partir des mesures faites par Miura, on considère une contraction instantanée et irréversible du film de silicium amorphe à la température de 600°C (i.e., température de cristallisation). Cette contraction du film est appliquée uniformément et isotropiquement au film. On lui associe alors une sollicitation en déformation de la forme:

$$\{\varepsilon_0^{\text{ext}}\} = \begin{Bmatrix} \varepsilon_{xx}^0 \\ \varepsilon_{yy}^0 \\ 2\varepsilon_{xy}^0 \end{Bmatrix} = (1 + \nu) \begin{Bmatrix} \varepsilon^{\text{crist}} \\ \varepsilon^{\text{crist}} \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (\text{IV.48})$$

où $\varepsilon^{\text{crist}}$ représente la contraction constante de 0.6%.

IV.3.3 *Effet des niveaux élevés de dopage*

L'effet du désaccord de maille du cristal de silicium peut se manifester, soit lors la création de zones localisées fortement dopées, soit lors d'une épitaxie de dopage très différent de celui du substrat.

Les dopants introduits dans le substrat possèdent des tailles atomiques plus ou moins différentes de celle du silicium. Par exemple, l'atome de bore a un rayon covalent de 0.88\AA , alors que celui du silicium est de 1.17\AA . Quand l'atome de bore se trouve en site substitutionnel dans la matrice (figure IV.9), une contraction locale de la maille a du cristal est engendrée.

L'application de la loi de Vegard permet d'établir une proportionnalité entre la contraction relative de la maille $\Delta a/a$ d'une zone du cristal et la concentration uniforme en dopants C_d de cette zone [46]:

$$\frac{\Delta a}{a} = \beta \cdot C_d \quad (\text{IV.49})$$

où β est le facteur d'expansion de la maille ($[\text{cm}^3]$). Sa valeur peut être estimée à partir des

rayons covalents de Pauling du dopant R_d et du silicium R_{Si} [47]. Suivant que l'on suppose une déformation linéaire (β_l) ou volumique (β_v), on peut définir deux formulations pour ce facteur d'expansion [48]:

$$\beta_l = \left[\frac{R_d}{R_{Si}} - 1 \right] / N_{Si} \quad \text{et} \quad \beta_v = \left[\left(\frac{R_d}{R_{Si}} \right)^3 - 1 \right] / 3N_{Si} \quad (\text{IV.50})$$

où N_{Si} est la densité atomique du silicium (5×10^{22} at./cm³). Comme on peut le constater au tableau IV.2, les valeurs données par ces deux formulations sont d'autant plus grandes que les rayons sont différents de celui du silicium.

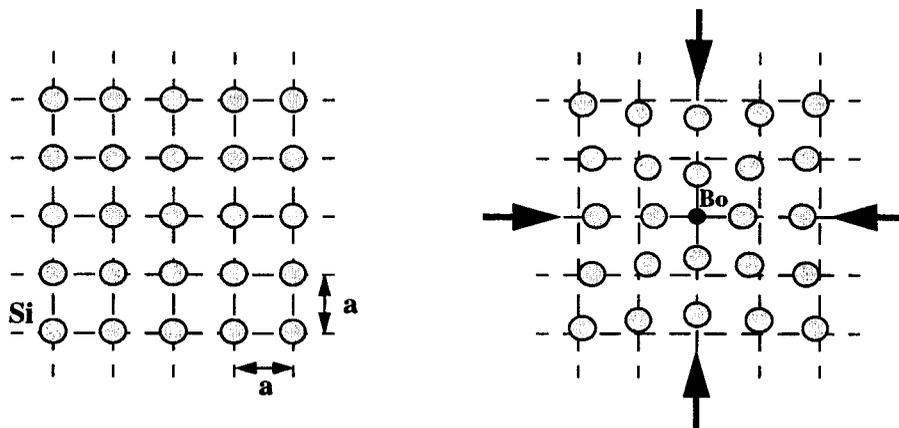


Figure IV.9: Contraction locale du cristal de silicium induite par un atome de bore en site substitutionnel.

Tableau IV.2: Valeurs théoriques des coefficients d'expansion β des principaux dopants.

dopant	rayon covalent [Å]	β_l [$\times 10^{-24}$ cm ⁻³]	β_v [$\times 10^{-24}$ cm ⁻³]
Si	1.17	0.	0.
B	0.88	-4.96	-3.83
P	1.10	-1.20	-1.13
As	1.18	+0.17	+0.17
Ge	1.22	+0.86	+0.89
Sb	1.36	+3.25	+3.80
In	1.44	+4.61	+5.76

Par ailleurs, Horn a mesuré par densitométrie les variations du paramètre de maille du silicium en fonction de la concentration en Bore [49]. Les déformations hydrostatiques mesurées sont comparées aux valeurs théoriques des coefficients d'expansion linéaire et volumique à la figure IV.10. Le coefficient β_l permet d'obtenir un bon accord avec les valeurs extraites par Horn.

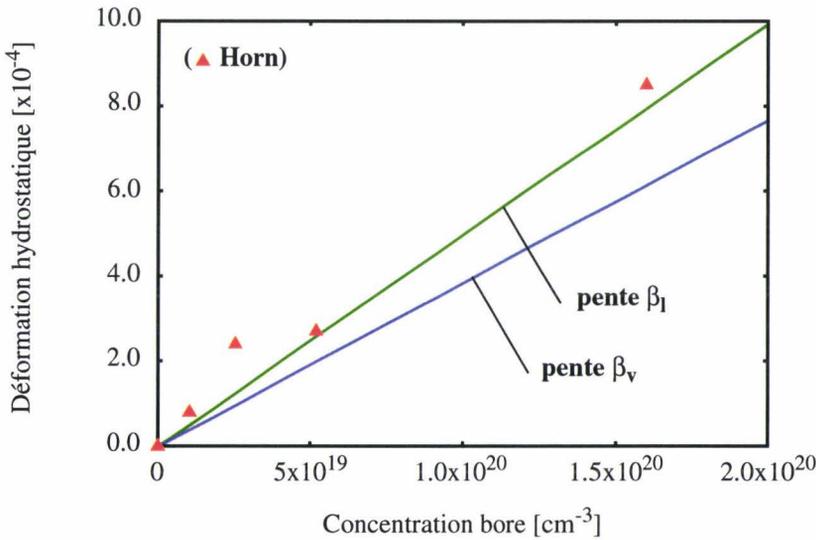


Figure IV.10: Déformation hydrostatique en fonction de la concentration en bore [49].

La modélisation éléments-finis de ce phénomène sera introduite par une sollicitation en déformation, élastique et isotrope. En vertu du principe de superposition, il est tout à fait possible d'évaluer simultanément la contribution de plusieurs dopants. Ceci permet par exemple d'étudier l'effet de compensation d'un dopage en germanium d'une zone préalablement dopée en bore. Ainsi, la déformation initiale est affectée par élément fini en fonction de la concentration moyenne $C_{d^{(i)}}$ et du coefficient d'expansion linéaire $\beta_{l^{(i)}}$ de chaque dopant i .

Avec l'hypothèse des déformations planes, son expression 2D est:

$$\{\epsilon_0^{ext}\} = \begin{Bmatrix} \epsilon_{xx}^0 \\ \epsilon_{yy}^0 \\ 2\epsilon_{xy}^0 \end{Bmatrix} = (1 + \nu) \begin{Bmatrix} \sum_{i=1}^{dopants} \beta_{l^{(i)}} \cdot C_{d^{(i)}} \\ \sum_{i=1}^{dopants} \beta_{l^{(i)}} \cdot C_{d^{(i)}} \\ 0 \end{Bmatrix} \tag{IV.51}$$

IV.3.4 Modélisation de la croissance des matériaux

IV.3.4.1 Approche de Deal & Grove

Suivant les travaux de Deal&Grove, il est possible de modéliser la plupart des processus de croissance de matériaux par un mécanisme de diffusion/réaction [50]. La formation d'oxyde et de siliciure fait partie de cette catégorie de processus.

Dans le modèle de Deal&Grove, la cinétique de croissance est gouvernée par l'égalité de

trois flux correspondant respectivement au transport, à la diffusion et à la réaction des agents réactifs.

Qu'il soit appliqué à l'oxydation du silicium [26] ou à la siliciuration du titane [51], ce modèle se traduit par une loi dite "linéaire-parabolique", définissant l'épaisseur x_g du matériau en croissance à un instant t de la manière suivante:

$$\frac{x_g^2}{B} + \frac{x_g}{B/A} = (t + \tau) \quad (\text{IV.52})$$

avec

$$B = \frac{2DC^{\text{lim}}}{N_1} \quad (\text{IV.53})$$

$$\frac{B}{A} = \frac{k_{\text{eff}}C^{\text{lim}}}{N_1} \quad (\text{IV.54})$$

$$k_{\text{eff}} = \frac{k_r k_t}{k_r + k_t} \quad (\text{IV.55})$$

où B et B/A sont respectivement les constantes linéaires et paraboliques de la cinétique; τ correspond à un décalage en temps dont la valeur est déterminée en fonction de l'épaisseur initiale du matériau x_0 ; D est la diffusivité effective des agents réactifs; C^{lim} est la concentration maximale des agents réactifs à la surface avec leur source; et k_t est le coefficient de transfert de masse; k_r est le coefficient de réaction.

Remarque: selon l'épaisseur du matériau en croissance, l'équation (IV.52) peut se simplifier:

$$\text{i) } x_g \ll \text{ alors } x_g = B/A \cdot (t + \tau) \quad (\text{IV.56})$$

La cinétique est limitée par la vitesse de réaction (*régime linéaire*).

$$\text{ii) } x_g \gg \text{ alors } x_g^2 = B \cdot (t + \tau) \quad (\text{IV.57})$$

La cinétique est limitée par la diffusivité des réactants (*régime parabolique*).

Nous allons détaillé à présent l'application du modèle de croissance de Deal&Grove à deux étapes technologiques couramment utilisées: l'oxydation du silicium et la formation des siliciures.

IV.3.4.2 Application à l'oxydation du silicium

De nombreux travaux relatifs à l'oxydation bidimensionnelle du silicium ont déjà été entrepris et implantés, que ce soit dans les simulateurs élaborés dans l'équipe [52], que dans ceux disponibles dans le commerce [53,54]. La différence majeure entre ces modèles consiste dans le modélisation rhéologique des matériaux (oxyde, nitrure, polysilicium), dans la prise en compte des effets des contraintes sur la croissance et enfin dans la discrétisation et la résolution numérique des modèles.

i. Traitement du maillage- La résolution du problème mécanique nécessite un traitement très complexe du maillage. Nous rappelons ci-dessous les grandes lignes de ce traitement développé en 2D [26], puis nous décrivons les stratégies élaborées pour son extension au cas tridimensionnel.

Deux stratégies ont été développées pour le traitement numérique de la croissance de l'oxyde [26]: une modélisation complète et une modélisation incomplète (figure IV.11).

□ Modélisation complète:

La résolution de la diffusion des agents oxydants permet de définir en tout nœud de l'interface oxydée la quantité de silicium ou de polysilicium consommé par la réaction. Ceci permet de définir une nouvelle enveloppe correspondant à cette consommation (figure IV.11.b). On impose alors une précontrainte de compression dans la couche de silicium qui a été consommée correspondant à l'expansion uniaxiale du nouvel oxyde. Considérant que la nouvelle couche d'oxyde en expansion est purement élastique, il en résulte que la précontrainte est égale à:

$$\{\sigma_0^{\text{ox}}\} = [D^{\text{el}}]\{\varepsilon_0^{\text{ox}}\} \quad (\text{IV.58})$$

avec

$$\{\varepsilon_0^{\text{ox}}\} = \frac{1 - \alpha_{\text{ox}}}{\alpha_{\text{ox}}} \cdot \{n^{\text{ox}}\} \quad (\text{IV.59})$$

où α_{ox} correspond au rapport de volume de la conversion du silicium en oxyde (i.e., $\alpha = 0.44$); $\{n^{\text{ox}}\}$ est le vecteur normal à l'interface Si/SiO₂. Le problème mécanique non-linéaire est alors résolu suivant le processus itératif décrit à la figure IV.3. Lorsque la convergence globale sur les déplacements est obtenue (figure IV.11.c), les deux domaines d'oxyde (ancien et nouveau) sont réunis et un remaillage complet est réalisé (figure IV.11.d).

□ Modélisation incomplète:

La résolution de la diffusion des agents oxydants permet de définir en tout nœud de l'interface oxydée la vitesse d'oxydation et donc le champ de déplacements imposable sur les nœuds de l'ancien oxyde en contact avec les matériaux oxydés. Le problème mécanique est uniquement résolu sur les matériaux nitrure et ancien oxyde. Après convergence, le nitrure et l'ancien oxyde sont déformés conformément au champ de déplacements calculé (figure IV.11.b'). Les coordonnées des nœuds du domaine consommé (silicium ou polysilicium) précédemment en contact avec l'ancien oxyde sont également recalculées en conséquence (figure IV.11.c'). Le nouveau domaine d'oxyde est mis à jour et l'ensemble de la structure est remaillée.

Les deux stratégies présentées ci-dessus sont transposables en 3D. Cependant, deux difficultés majeures apparaissent qu'il a fallu résoudre: i) l'augmentation très importante du temps de calcul liée à l'augmentation du nombre de degrés de liberté et du nombre de nœuds, et ii) la difficulté de maintenir un maillage 3D géométriquement correct dans un problème aux

frontières libres (*moving boundary*). Nous allons exposer comment la première difficulté a été résolue. Bozek détaille comment résoudre la seconde [24].

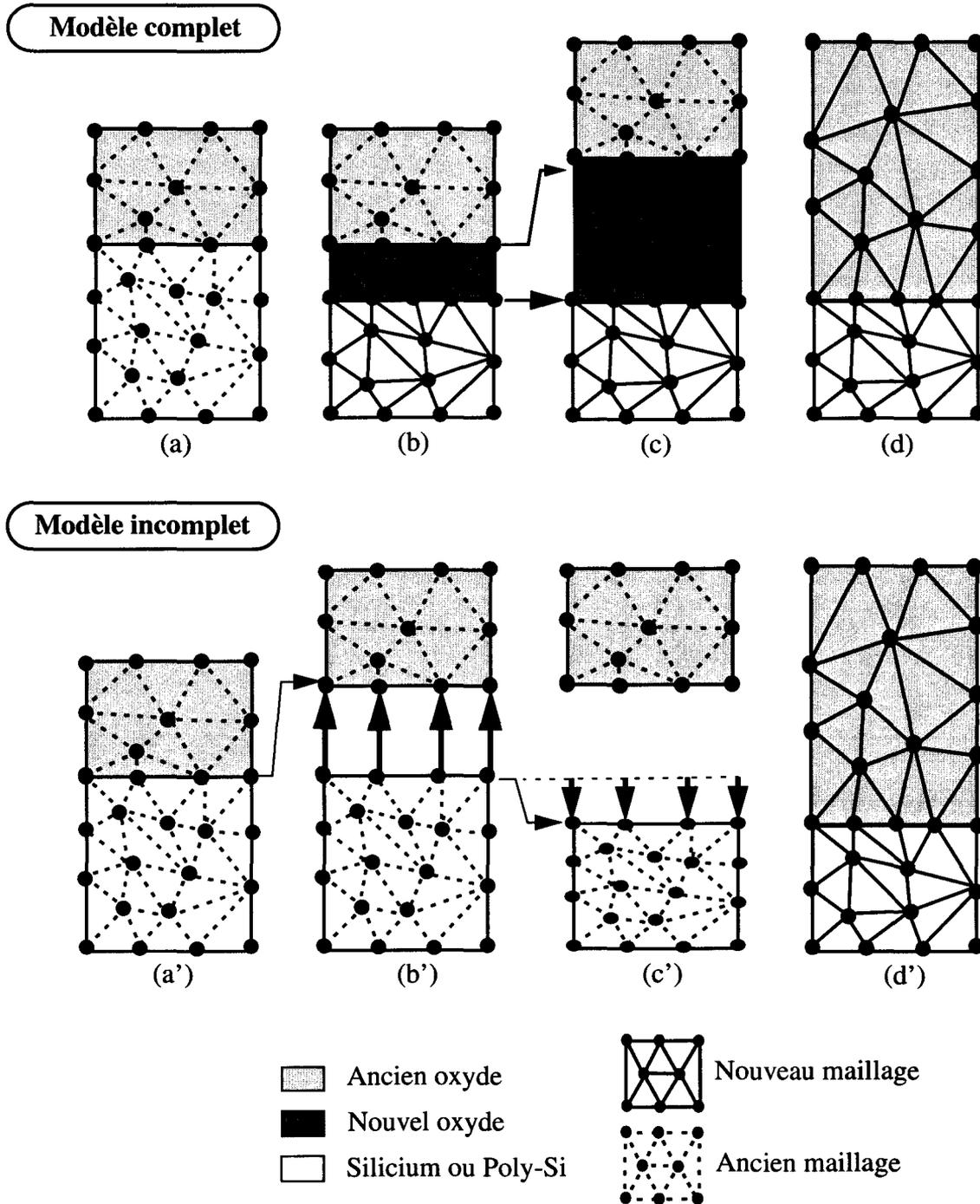


Figure IV.11: Modèle de croissance complet et incomplet de l'oxyde.

□ Traitement du maillage et amélioration du temps de calcul:

Comme nous avons déjà pu le souligner, il n'existe pas à l'heure actuelle de stratégie pour maintenir cohérente la géométrie d'une enveloppe 3D se déformant au cours du temps (i.e.,

éviter la formation de boucles). De plus, comme les étapes d'interpolation apportent de nombreuses erreurs numériques, nous avons privilégié une approche sans remaillage complet de la structure.

Pour la méthode complète, le fait de ne pas effectuer le remaillage final (étapes (d) de la figure IV.11) revient à ajouter une "couche" d'éléments finis supplémentaires dans l'oxyde à chaque pas de temps. La précision du calcul de la croissance de l'oxyde prescrit la discrétisation temporelle à définir (ex.: pour la réalisation d'un LOCOS ($t_{ox} \sim 0.8\mu\text{m}$), une cinquantaine de pas de temps est généralement requise). L'augmentation exagérée de points de discrétisation du domaine d'oxyde pénalise alors fortement le temps de calcul. En effet, pour un même niveau de discrétisation, le nombre de nœuds du maillage 3D sera approximativement \sqrt{N} plus grand qu'en 2D, où N est le nombre de nœuds du maillage 2D. La pratique montre que le rapport des temps de calcul entre le 3D et le 2D pour le modèle complet, toujours en gardant un même niveau de discrétisation, est au moins aussi important que \sqrt{N} . Typiquement, pour un maillage 2D contenant 5000 nœuds, le temps de calcul pour la croissance d'un LOCOS est de l'ordre d'une demi heure. La simulation 3D avec le même niveau de discrétisation (i.e., ~350000 nœuds) nécessitera dans ce cas plus d'une trentaine d'heures de calcul, ce qui interdit l'utilisation de cet outil de simulation pour des usages intensifs !

Pour la méthode incomplète, si le remaillage final n'est pas effectué (étapes (d') de la figure IV.11), le nombre de nœuds du domaine d'oxyde restera constant sur le pas de temps. Etendu à toute l'étape de croissance de l'oxyde, on peut aboutir au cas extrême où une isolation LOCOS ne sera discrétisée que par une seule "couche" d'éléments. La topographie de la structure s'en trouvera alors d'autant moins bien définie.

Quel que soit la méthode mise en œuvre, une étape de "relaxation nodale" permet de répartir à peu près uniformément les nœuds dans l'oxyde après la mise à jour de sa topographie [24].

La stratégie adoptée dans ce travail vise à combiner les deux approches: lors de la simulation de la croissance d'un oxyde épais, la méthode complète est utilisée périodiquement pour ajouter des points de discrétisation dans le domaine en croissance, les autres pas de temps étant traités avec la méthode incomplète. Cette périodicité est modulable mais l'expérience montre que la simulation d'un pas de temps avec la méthode complète tous les cinq pas de temps constitue un bon compromis entre précision et rapidité de calcul. Des tests quantifieront les performances obtenues au chapitre suivant.

□ Calcul des contraintes dans le silicium:

La méthode incomplète est intrinsèquement plus rapide que la méthode complète dans le sens où la résolution du problème viscoélastique non-linéaire est réalisé en supposant que le silicium est un corps rigide. De ce fait, les déplacements des nœuds du silicium ne sont pas calculés lors de la boucle non-linéaire, mais a posteriori. Par contre, pour la méthode complète, l'assemblage est effectué sur les éléments de tous les domaines. Les contraintes peuvent donc

être obtenues simultanément pour l'ensemble de la structure simulée.

Des travaux antérieurs en 2D ont prouvé que l'hypothèse de rigidité n'affectait pas le calcul car l'utilisation de l'une ou l'autre de ces deux méthodes aboutissait aux mêmes résultats, en terme de topographie ou en terme de champs de contraintes (oxyde et nitrure) [26]. Cette hypothèse est d'autant plus justifiée que les comportements visqueux de l'oxyde diminuent sa rigidité aux températures usuelles de croissance ($\geq 850^\circ\text{C}$).

En 3D, nous sommes parti de ces constatations pour appliquer une technique permettant de calculer les contraintes dans le silicium avec la méthode incomplète. Cette stratégie s'appuie sur la propriété fondamentale que la déformation élastique d'un matériau est indépendante du chemin de charges. Autrement dit, tant que le silicium peut être considéré comme élastique, il est possible de découpler le calcul de ses contraintes de celui des matériaux viscoélastiques. D'autres simulateurs de procédés comme FLOOPS [32] ou SUPREM IV [55] ont déjà justifié l'application en 2D de cette méthode qui porte le nom de "méthode des chargements aux frontières" (*Boundary Loading Method*). Le principe est le suivant: après le calcul non-linéaire sur les matériaux viscoélastiques (oxyde et nitrure) en considérant le substrat rigide, le tenseur des contraintes dans les éléments de l'oxyde le long de l'interface Si/SiO₂ est moyenné aux nœuds interfaces. Les contraintes ainsi calculées sont converties en forces agissant sur la surface du silicium simplement en projetant le tenseur des contraintes $\{\sigma\}$ selon le vecteur normal local $\{\mathbf{n}\}$ de l'interface:

$$\begin{Bmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{Bmatrix} \quad (\text{IV.60})$$

Un équilibrage mécanique du silicium seul est alors effectué en utilisant ces forces comme conditions aux limites. Les contraintes sont ensuite obtenues à partir des déplacements calculés. Pour cette deuxième étape, le silicium n'est plus rigide mais élastique.

Prenons un exemple pour quantifier le gain en terme de temps de calcul qu'apporte l'utilisation de la "méthode des chargements aux frontières", appliquée à la méthode incomplète de croissance.

Exemple: la structure considérée est une isolation de type LOCOS, réalisée par une oxydation en ambiance humide à 900°C pendant 90 minutes. Dans un premier temps, la simulation est effectuée en 15 pas de temps en activant le modèle complet de croissance à chaque pas de temps. L'assemblage éléments finis, et donc le calcul des contraintes, sont effectués sur tous les domaines simultanément. Comme aucun remaillage n'est permis, la méthode complète ajoute des nouveaux éléments dans l'oxyde à chaque pas de temps. Le maillage 3D et le champ de pression hydrostatique à la fin de la simulation sont représentés à la figure IV.12.a. La structure finale contient 77751 éléments finis (40656 initialement, soit une augmentation de 90%). Le

temps de calcul CPU¹ est de 7047 secondes.

On effectue ensuite la simulation de la même structure mais en activant le modèle complet que tous les cinq pas de temps, les autres pas de temps étant effectués avec le modèle incomplet avec un calcul des contraintes *a posteriori* par la "méthode des chargements aux frontières". On qualifie cette procédure de "méthode mixte". Les résultats obtenus sont reportés à la figure IV.12.b. Par cette méthode, le temps de calcul est réduit à 2349 secondes, soit un gain proche d'un facteur 3 par rapport à la méthode complète. Cette amélioration est essentiellement due à la minimisation du nombre de nouveaux éléments créés dans l'oxyde. En effet, la structure finale ne contient plus que 47835 éléments, soit une augmentation de 17% seulement.

Par ailleurs, on constate que les champs de pression hydrostatique calculés par ces deux méthodes sont tout à fait similaires. Cette vérification permet de valider la "méthode des chargements aux frontières".

En conclusion, la méthode mixte constitue le meilleur compromis entre nombre d'éléments de la structure et rapidité de calcul. C'est cette méthode qui sera privilégiée pour les simulations 3D effectuées dans ce travail.

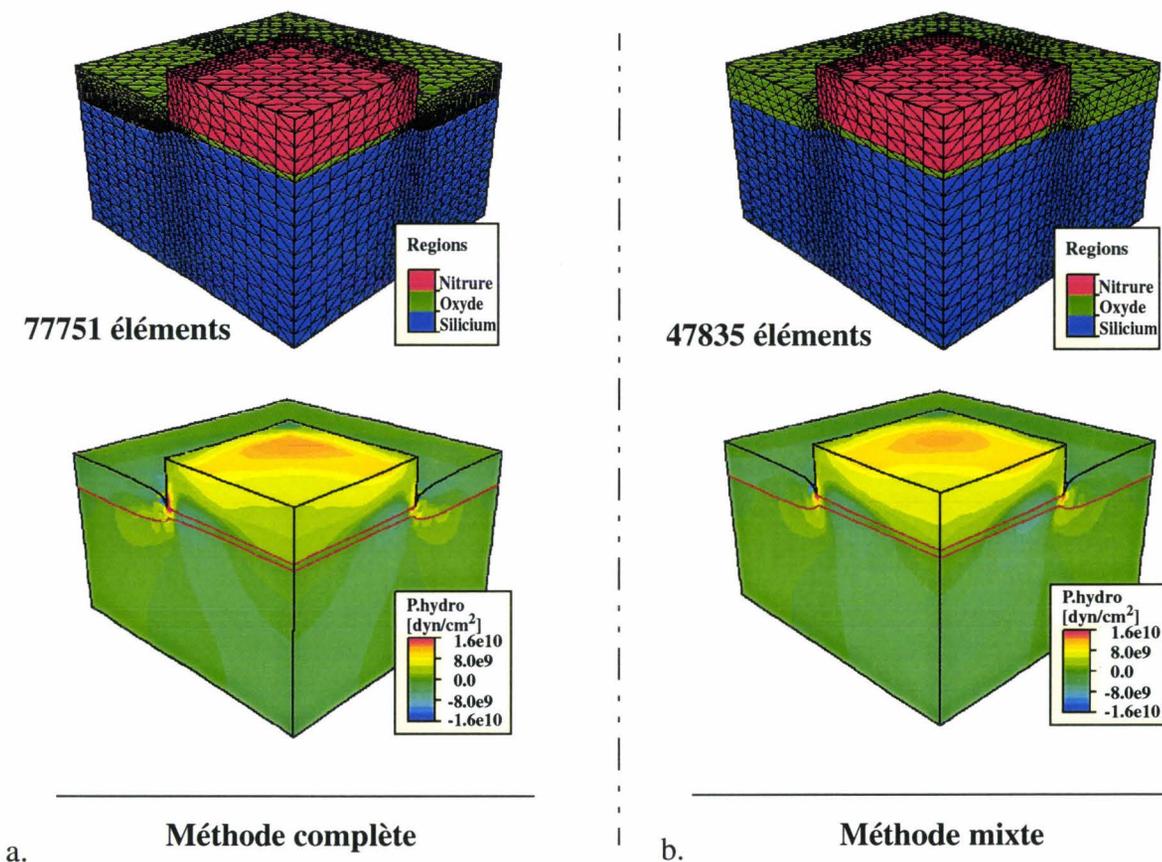


Figure IV.12: Simulations 3D de la croissance d'un LOCOS (900°C, 90min) en utilisant la méthode complète (a), et la méthode mixte (b).

1. SUN Ultra 4 - 400MHz

ii. Modélisation de l'expansion latérale- La génération des contraintes mécaniques lors du processus d'oxydation est largement dépendant du type d'expansion volumique qui accompagne la réaction. La quasi-totalité des simulateurs de procédés actuels considère qu'essentiellement toute l'expansion est normale au front d'oxydation (i.e., croissance unidirectionnelle), comme représenté à la figure IV.11.a [26,32,55]. Cependant, des expériences d'oxydation plane ont prouvé que les substrats se courbent progressivement au fur et à mesure que l'oxyde croît, avec une courbure concave en face arrière (figure IV.13.b) [56,57,58]. Cette observation indique clairement l'existence de contraintes biaxiales compressives relativement importantes.

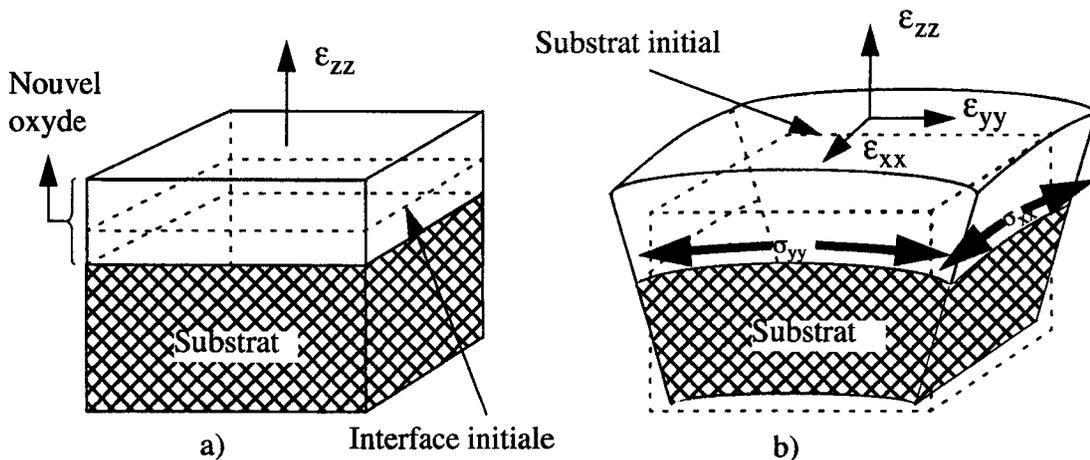


Figure IV.13: Schématisation de la croissance de l'oxyde lors de sa croissance: croissance uniaxiale (a), croissance avec dilatation latérale (b) [5].

Certains auteurs tiennent compte de cet effet en définissant une dilatation parfaitement isotrope de l'oxyde proportionnelle à la conversion d'un volume unitaire de silicium en SiO_2 [59]. Cette pré-déformation devant être appliquée élastiquement, de manière à obtenir l'épaisseur de la nouvelle d'oxyde en accord avec la cinétique, cette méthode conduit à des niveaux de contraintes excessifs ($\sim 10\text{GPa}$ en compression dans l'oxyde). Suivant l'approche de Delph, on définit une déformation latérale intrinsèque, appliquée à la nouvelle couche d'oxyde créée [60]. Pour connaître la valeur de cette déformation, on part de l'observation faite par Yu [58]: en calculant la contrainte biaxiale d'un film d'oxyde lors de sa croissance (par une technique de déflexion de plaque *in-situ*), Yu constate que cette contrainte tend vers une valeur constante $\sigma_{\text{ox}}^{\text{int}} = -400\text{MPa}$ pour les faibles épaisseurs, quel que soit la température d'oxydation. Or ces faibles épaisseurs ($< 50\text{\AA}$) correspondent à des temps d'oxydation très courts pour lesquels les phénomènes visqueux restent négligeables devant le comportement élastique de l'oxyde. La déformation intrinsèque élastique $\epsilon_{\text{ox}}^{\text{int}}$ est donc calculée par:

$$\epsilon_{\text{ox}}^{\text{int}} = \frac{1}{\left(\frac{E_{\text{ox}}}{1 - \nu_{\text{ox}}} \right)} \cdot \sigma_{\text{ox}}^{\text{int}} \quad (\text{IV.61})$$

où $E_{\text{ox}} = 66\text{GPa}$ et $\nu_{\text{ox}} = 0.17$ sont le module d'Young et le coefficient de Poisson de l'oxyde,

respectivement. La valeur trouvée est du même ordre de grandeur de celle établie par Delph (1.95×10^{-3}) [60].

Pour le calcul numérique, cette déformation latérale intrinsèque est appliquée dans le cas du modèle complet à tous les éléments définissant la nouvelle couche d'oxyde.

iii. Effet des contraintes sur la croissance- Les contraintes générées lors de l'oxydation thermique du silicium sont connues pour réduire à la fois le coefficient de réaction de la cinétique $k_r = k_{si}$ dans l'équation (IV.55), et la diffusivité des agents oxydants, $D = D_{ox}$ dans l'équation (IV.53). C'est à Kao que l'on doit la première étude quantitative de ces effets [61,62]. Elle consiste en l'oxydation de structures de silicium de formes convexes et concaves réalisées par gravure sèche. Cette procédure expérimentale lui a permis de montrer que la cinétique d'oxydation était plus prononcée sur une forme concave que convexe. Le ralentissement de la cinétique est donc essentiellement gouvernée par l'état compressif de la silice.

Suivant les résultats de Kao, la diffusivité des agents oxydants dans la silice en fonction de son état de contraintes est gouvernée par les relations suivantes [26]:

$$D_{ox}^{(\sigma)} = D_{ox}^{(0)} \cdot \exp\left(-\frac{PV_D}{kT}\right) \quad \text{pour } P > 0 \quad (\text{IV.62})$$

$$D_{ox}^{(\sigma)} = D_{ox}^{(0)} \quad \text{pour } P \leq 0 \quad (\text{IV.63})$$

où P représente la pression hydrostatique de la silice (i.e., moyenne des contraintes normales) et V_D le volume d'activation de l'effet retardateur.

Lorsque la surface du substrat est comprimée par une contrainte normale, l'énergie d'activation théoriquement nécessaire à la réaction (correspondant à la rupture d'une liaison Si-Si) n'est plus suffisante. En effet, l'expansion de volume du nouvel oxyde doit contrebalancer en plus la contrainte normale. Ceci se traduit par une modification de l'énergie d'activation du processus tenant compte de ce travail supplémentaire que doit fournir la silice en expansion [26]. Dans l'hypothèse d'une croissance unidirectionnelle (figure IV.13.a), seules les contraintes compressives normales σ_{nn} à l'interface Si/SiO₂ réduiront le coefficient de réaction:

$$k_{Si}^{(\sigma)} = k_{Si}^{(0)} \cdot \exp\left(\frac{\sigma_{nn} V_k}{kT}\right) \quad \text{pour } \sigma_{nn} < 0 \quad (\text{IV.64})$$

$$k_{Si}^{(\sigma)} = k_{Si}^{(0)} \quad \text{pour } \sigma_{nn} \geq 0 \quad (\text{IV.65})$$

où V_k est le volume d'activation de l'effet retardateur. C'est la formulation adoptée jusque là dans nos simulateurs.

Si les contraintes à l'interface Si/SiO₂ ne sont plus uniaxiales mais biaxiales (figure IV.13.b), il faut introduire une dépendance plus complexe en contrainte pour le terme correctif: un choix naturel consiste à remplacer la contrainte normale σ_{nn} par la pression hydrostatique. Dans ce cas là, la nécessité d'une re-calibration de l'énergie d'activation V_k doit être évaluée.

Bien que l'effet retardateur d'un état de compression sur la cinétique d'oxydation ait pu être validé par de nombreuses études, l'effet accélérateur de contraintes en tension est nettement plus incertain: en appliquant une courbure externe convexe à un substrat, certains travaux ont observé une réduction de la vitesse de croissance de l'oxyde par rapport à un substrat non-contraint [63,64]. Mais cet effet semble dépendre de la procédure expérimentale car il n'est pas systématiquement reproduit [65].

Que ce soit pour la diffusivité des agents oxydants ou le coefficient de réaction, nous négligerons l'effet des contraintes en tension.

IV.3.4.3 Application à la siliciuration du silicium

La réalisation de siliciures peut se faire à partir de nombreux métaux réfractaires (Ti, Co, W, Ni...). Les mécanismes de croissance sont sensiblement identiques. Un certain nombre de travaux de modélisation ont démontré qu'une approche de type Deal&Grove était à même de reproduire cette cinétique [66,51]. La principale différence entre les cinétiques des siliciures réside dans l'espèce qui diffuse majoritairement: soit ce sont les atomes de silicium qui diffusent à travers la couche de siliciure déjà formé pour réagir à l'interface siliciure/métal (TiSi_2 , WSi_2 , MoSi_2), soit ce sont les atomes de métal qui diffusent jusqu'à l'interface (poly)silicium/siliciure (CoSi_2 , NiSi , PtSi). Les cas où les atomes de silicium et de métal diffusent dans les mêmes proportions sont exceptionnels (Pd_2Si).

Pour ce travail, nous nous limitons à l'étude du siliciure le plus répandu à l'heure actuelle: le siliciure de titane. A partir de ce modèle, l'extension à d'autres types de siliciures ne présente pas d'obstacles majeurs. Par ailleurs, nous nous limitons à une modélisation 2D de la croissance, afin de contourner les problèmes de maillage 3D.

La connaissance et la modélisation de la croissance des siliciures sont loins d'être aussi matures que pour l'oxydation. Nous avons adopté une approche de type Deal&Grove pour modéliser cette croissance.

La croissance du siliciure de titane peut être réalisé par un recuit classique ou par un recuit rapide RTA (*Rapid Thermal Annealing*). La technique la plus utilisée reste le recuit RTA sous azote. Elle produit à la fois le TiSi_2 (à la surface du silicium) et le TiN (à la surface libre du Ti). La croissance du TiN peut être décorrélée du processus de formation du TiSi_2 , et par conséquent, nous l'avons ignorée. Le TiSi_2 possède deux phases: la phase métastable fortement résistive C49, et la phase faiblement résistive C54 [68]. Deux traitements thermiques sont généralement utilisés: le premier est typiquement effectué à 600-700°C pour réaliser la croissance du film, mais c'est la phase C49 qui est formée. La température de ce premier recuit doit être inférieure à 700°C pour éviter la réaction du titane avec l'oxyde des espaceurs ou des isolations. Le second recuit est réalisé après la gravure sélective du titane non consommé et du TiN . L'intérêt de ce recuit à plus haute température (700-900°C) est de convertir le TiSi_2 en sa phase faiblement résistive C54. Ce travail de modélisation a pour objectif d'étudier les contraintes générées par la croissance du matériaux. Et même si des modifications des contraintes internes du film sont à prévoir lors du changement de phase, aucune étude

expérimentale ne les a encore quantifiées. L'essentiel du modèle se focalisera donc sur les contraintes issues du premier recuit, et la phase du film ne sera pas considérée.

i. Cinétique de la réaction- Par analogie avec la modélisation de l'oxydation du silicium, la croissance du siliciure de titane s'articule en deux temps: tout d'abord on résout la diffusion des agents réactifs (i.e., atomes de silicium), puis on calcule l'expansion volumique du film.

La croissance des siliciures étant gouvernée par un mécanisme lacunaire [67], le flux d'atomes de silicium dans le TiSi_2 est donc accompagné d'un flux de lacunes en sens inverse. Dans un mécanisme lacunaire, le coefficient de diffusion de l'espèce dépendant de la concentration de lacunes, le gradient de lacunes dans la couche de TiSi_2 a pour conséquence une variation du coefficient de diffusion du silicium à travers la couche de TiSi_2 . En toute rigueur, il est donc nécessaire de résoudre simultanément la diffusion des atomes de silicium et des lacunes dans la couche de siliciure en croissance. Fornara a démontré que l'égalité des flux de silicium et de lacunes impose que la diffusivité des atomes de silicium soit la même que celle des lacunes. Cela permet de simplifier le problème et de considérer que la diffusion d'une seule espèce, les réactants (i.e., atomes de silicium). On peut alors leur affecter une diffusivité effective D qui ne dépend pas de la position de la couche (aux effets de contraintes près).

Si l'on considère à nouveau une approche de type Deal&Grove, les atomes de silicium sont injectés à partir du matériau source (silicium ou polysilicium), diffusent à travers le matériau en croissance (TiSi_2) et réagissent à l'interface avec le matériau consommé (Ti).

Lors de sa croissance, le TiSi_2 a une composition sous stœchiométrique ($\text{TiSi}_{2-\epsilon}$) du côté riche en titane (elle est stœchiométrique du côté silicium) [69]. Il y aura donc croissance de TiSi_2 tant que la stœchiométrie ne sera pas atteinte. D'un point de vue physique, la sous stœchiométrie du côté titane correspond à une surconcentration de lacunes. Suivant l'approche proposée par Fornara [51], la surconcentration de lacunes est prise en compte dans le modèle en introduisant une surconcentration fictive d'atomes de silicium à l'interface Si/ TiSi_2 . La concentration limite C^{lim} à cette interface est alors définie par:

$$C^{\text{lim}} = \epsilon \cdot N_1 \quad (\text{IV.66})$$

où N_1 correspond ici au nombre d'atomes de silicium dans le TiSi_2 par unité de volume ($N_1 = 4.68 \times 10^{22}$ at./ cm^3). La concentration C^{lim} n'est pas accessible à l'expérience et elle est fixée empiriquement [51]: $C^{\text{lim}} = 0.5\% N_1$.

ii. Changements de volume au cours de la réaction- La résolution de la diffusion des atomes de silicium est suivie de la consommation du substrat de silicium (ou du polysilicium) et du titane, puis de la croissance du TiSi_2 , en tenant compte des comportements rhéologiques complexes des matériaux de la structure.

A chaque pas de temps Δt , les épaisseurs locales consommées de titane δ_{Ti} et de silicium

δ_{Si} sont déduites de la concentration locale C de silicium:

$$\delta_{Ti} = \frac{(1 - \alpha_{sil})k_r C \Delta t}{N_1} \tag{IV.67}$$

$$\delta_{Si} = \frac{k_t(C - C^{lim})\Delta t}{N_1} \tag{IV.68}$$

où α_{sil} représente le rapport de volume de la conversion du titane en $TiSi_2$ ($\alpha = 0.412$ [51]).

Ce rapport de volume définit l'épaisseur de $TiSi_2$ nouvellement créé à partir de la quantité de titane consommée δ_{Ti} .

iii. Stratégies numériques- La traitement numérique de la croissance du siliciure de titane est très proche de celui utilisé pour l'oxydation. La différence essentielle est qu'il y a une consommation du matériau source dans le cas de la siliciuration (i.e., le silicium). Les différentes étapes du traitement sont illustrées à la figure IV.14.

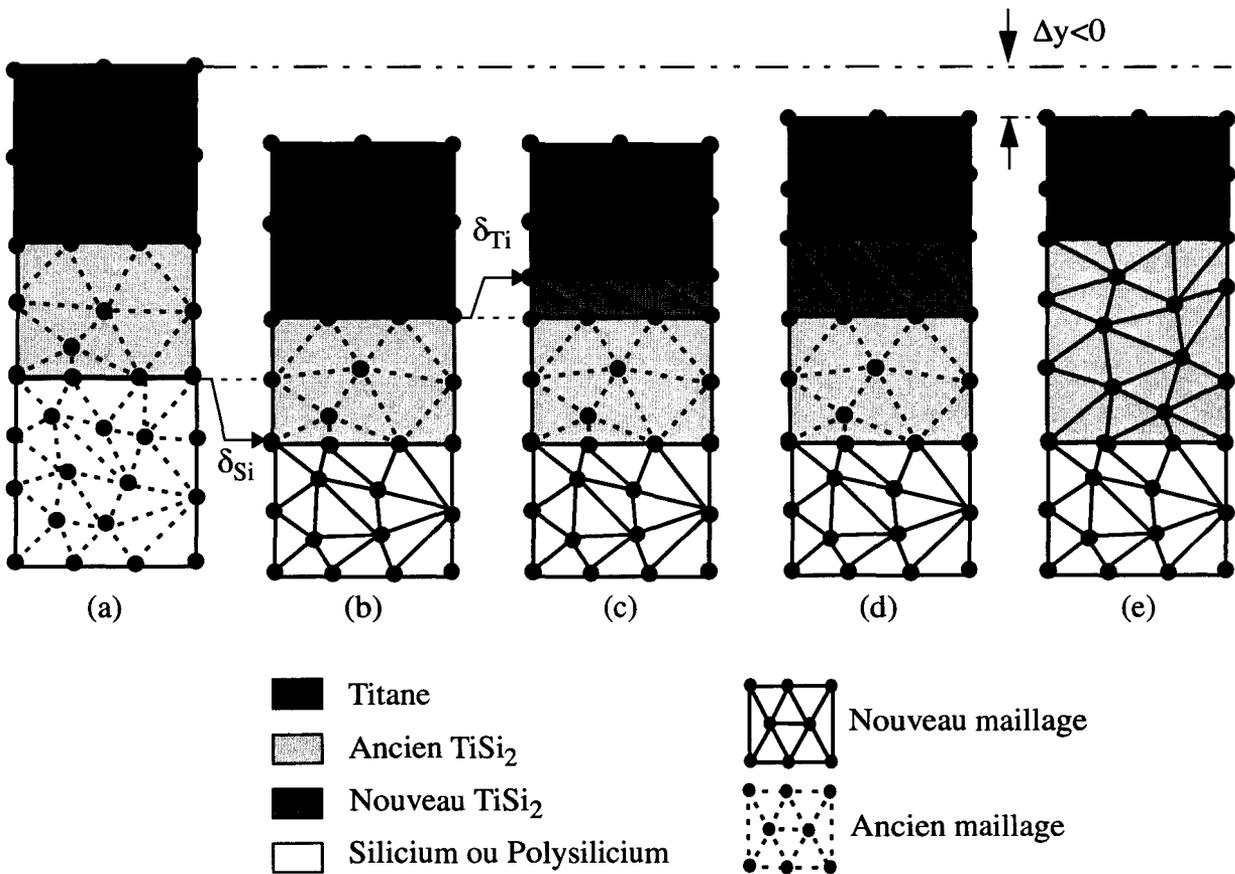


Figure IV.14: Modèle de croissance du $TiSi_2$.

Après le calcul de la diffusion des atomes de silicium dans le $TiSi_2$, un premier équilibrage mécanique est réalisé en imposant les déplacements de l'interface $Si/TiSi_2$ en fonction de la consommation locale δ_{Si} (figure IV.14.b). L'injection des atomes de silicium correspondant à

cette consommation n'est pas supposée modifier les contraintes internes du film [70]. A l'interface TiSi_2/Ti , la croissance du TiSi_2 est traitée de manière similaire à celle de l'oxyde: une nouvelle couche de TiSi_2 d'épaisseur δ_{Ti} est créée et une sollicitation en déformation proportionnelle à la transformation du Ti en TiSi_2 lui est appliquée (figure IV.14.c et d):

$$\{\epsilon_0^{\text{sil}}\} = \frac{1 - \alpha_{\text{sil}}}{\alpha_{\text{sil}}} \cdot \{\mathbf{n}^{\text{sil}}\} \quad (\text{IV.69})$$

où \mathbf{n} est le vecteur normal à l'interface Ti/TiSi_2 .

Le nouveau domaine de siliciure est mis à jour et l'ensemble de la structure est remaillée (figure IV.14.e).

L'ensemble de ces réactions (consommations + croissances) induit une réduction globale de volume et permet de reproduire l'enfoncement caractéristique de la couche de TiSi_2 dans le substrat de silicium.

iv. Effet des contraintes sur la croissance- Le TiSi_2 possède un comportement élastique dans la gamme de température [25°C-500°C], mais une relaxation très significative des contraintes est observée au delà de 700°C, c'est-à-dire dans la gamme des températures de croissance. Pour rendre compte de ces phénomènes rhéologiques complexes, un comportement viscoélastique linéaire est défini pour ce matériau. Ainsi, contrairement à l'oxyde, la dépendance non-linéaire de la viscosité par rapport au niveau de contraintes n'est pas considérée (aucune évidence expérimentale n'a confirmée cette dépendance à ce jour).

La question demeure quant à l'effet des contraintes sur la cinétique de la réaction (diffusivité du silicium, coefficient de réaction k_r). Kao a effectué récemment la même expérience que celle qui lui avait permis de mettre en évidence l'effet des contraintes pour l'oxydation [71]. Ses mesures ne révèlent qu'un effet limité des contraintes sur la cinétique du TiSi_2 . Cet aspect sera examiné plus en détails au chapitre suivant à partir d'autres observations.

Les bases des modèles de calcul de contraintes formulées, il reste à les valider et à les calibrer à partir de données expérimentales. Ceci fait l'objet du prochain chapitre.

Références Bibliographiques du Chapitre IV

- [1] S.M. HU, *Appl. Phys. Lett.*, **32**(1), p. 5, 1978.
- [2] S.M. HU, *J. Appl. Phys.*, **50**(7), pp. 4611-4666, 1979.
- [3] S.M. HU, *Stress from a Parallelepipedic Thermal Inclusion in a Semispace*, *J. Appl. Phys.*, **66**(6), pp. 2741, 1989.
- [4] N. GUILLEMOT, *A New Analytical Model of the Bird's Beak*, *IEEE Trans. Electron Dev.*, **ED-34**(5), p. 1033, 1987.
- [5] C.H. HSUEH et A.G. EVANS, *Oxidation Induced Stresses and Some Effects on the Behavior of Oxide Films*, *J. Appl. Phys.*, **54**(11), pp. 6672-6686, 1983.
- [6] J. VANHELLEMONT, S. AMELINCKX et C. CLAEYS, *J. Appl. Phys.*, **61**, p. 2170, 1987.
- [7] L. MANIGUET, M. IGNAT, M. DUPEUX, J.J. BACMANN et P. NORMANDON, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, **309**, p. 217, 1993.
- [8] I. DEWOLF, M. IGNAT, G. POZZA, L. MANIGUET et H.E. MAES, *Analysis of Local Mechanical Stress in and near Tungsten Lines on Silicon Substrate*, *J. Appl. Phys.*, **85**(9), pp. 6477-6485, 1999.
- [9] S.M. HU, *Stress from Isolation Trenches in Silicon Substrates*, *J. Appl. Phys.*, **67**(2), p. 1092, 1990.
- [10] S. NADAHARA, S. KAMBAYASHI, M. WATANABE et T. NAKAKUBO, *Micro Area Stress around Trench Structure*, Extended abstracts of the 19th conference on Solid State Devices and Materials, pp. 327-330, 1987.
- [11] R. SLEHOBR et G. HOBLER, *Efficient Simulation of 3D Stress Distributions at Trench Structures Caused by Thermal Mismatch of Trench Filling and Silicon Substrate*, *COMPEL- Int. J. Comp. & Math. Electrical and Electronic Eng.*, **13**(4), pp. 861-870, 1994.
- [12] T. HOFFMANN et V. SENEZ, *Analysis of the Stresses Induced by Silicon Dioxide Growth in STI using a 3-Dimensional Calibrated Numerical Oxidation Modeling*, *ISDRS Tech. Dig.*, pp. 207-210, 1999.
- [13] S.M. HU, *Stress-Related Problems in Silicon Technology*, *J. Appl. Phys.*, **70**, p. R53, 1991.
- [14] I. DEWOLF, IMEC (Belgium), communications privées.
- [15] O.C. ZIENKIEWICZ, *La Méthode des Eléments Finis*, Ed. Ediscience, 1973.
- [16] A. RODRIGUEZ-FERRAN, P. PEGON et A. HUERTA, *Two Stress Update Algorithms for Large Strains: Accuracy Analysis and Numerical Implementation*, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **40**, pp. 4363-4404, 1997.
- [17] H. UMIMOTO, S. ODANAKA et H. ESAKI, *Numerical Modeling of Nonplanar Oxidation Coupled with Stress Effects*, *IEEE Trans. on Computer-Aided Design*, **8**, p. 599, 1989.
- [18] V. SENEZ, D. COLLARD et B. BACCUS, *Quantitative 2D Stress Dependent Oxidation with*

- Viscoelastic Model*, SISDEP Tech. Digest, **5**, p. 165, 1993.
- [19] J.C. SIMO et R.L. TAYLOR, *Consistent Tangent Operators for Rate-Independent Elastoplasticity*, Comp. Meth. Appl. Mech. & Eng., **48**, pp. 101-118, 1985.
- [20] O.C. ZIENKIEWICZ, S. VALLIAPAN et I.P. KING, *Elasto-Plastic Solutions of Engineering Problems, Finite Element Approach*, Int. J. Num. Meth. Eng., **1**, pp. 75-100, 1969.
- [21] A. PEREZ-FOGUET, A. RODRIGUEZ-FERRAN et A. HUERTA, *Numerical Differentiation for Local and Global Tangent Operators in Computational Plasticity*, Int. J. Num. Meth. Eng. (à paraître).
- [22] B. BACCUS, *Simulation Bidimensionnelle de Technologies Silicium- L'Approche Multicouche*, Thèse de doctorat, USTL, 1990.
- [23] E. BAR et J. LORENZ, *3D Simulation of LPCVD Using Segment-Based Topography Discretization*, IEEE Trans. Semiconduct. Manufact., **9**(1), pp. 67-73, 1996.
- [24] S. BOZEK, *Génération de Maillage Automatique pour la Simulation Tridimensionnelle de Procédés de Fabrication de Circuits Intégrés*, Thèse de doctorat, USTL, 2000.
- [25] J. LORENZ, R. MINIXHOFER, S. LIST, A. BOURENKOV, V. SENEZ, J. KRAUSE et L. BOMHOLT, *PROMPT II Final Report- PartI: Technical Report for Publication*, 1999.
- [26] V. SENEZ, *Modélisation Bidimensionnelle de l'Oxydation du Silicium: Analyse Viscoélastique de la Relaxation des Contraintes*, Thèse de doctorat, USTL, 1995.
- [27] P. FERREIRA, *Introduction du Calcul Mécanique Généralisé dans la Simulation Bidimensionnelle de Procédés Technologiques Silicium*, Thèse de doctorat, USTL, 1999.
- [28] J.P. PENG et G.R. SRINIVASAN, *Non-Linear Visco-Elastic Modeling of Thermal Oxidation of SiO₂*, Nascod VII Tech. Dig., Eds. J.J.H. Miller, Front Range Press, USA, 1991.
- [29] J.P. PENG, D. CHIDAMBARRAO et G.R. SRINIVASAN, *NOVEL: A Nonlinear Viscoelastic Model for Thermal Oxidation of Silicon*, COMPEL, **10**(4), p. 341, 1991.
- [30] M.E. LAW, C.S. RAFFERTY et R.W. DUTTON, *SUPREM-IV User's Manual*, Stanford University, Stanford, 1989.
- [31] T. UCHIDA, N. KOTANI, K. KOBAYASHI et N. TSUBOUCHI, *A Simulation of Plastic Deformation of Silicon During Thermal Oxidation*, IEDM Tech Dig., pp. 315-318, 1993.
- [32] H. RUEDA, *Modeling of Mechanical Stress in Silicon Isolation Technology and its Influence on Device Characteristics*, Thèse de doctorat, Univ. of Florida, 1999.
- [33] T. HOFFMANN, P. LEDUC et V. SENEZ, *Finite-Element Calculations of Mechanical Stresses Induced by Water Adsorption/Desorption in Silicate Glasses*, J. Vac. Sci. Technol. B, **17**(5), pp. 2603-2609, 1999.
- [34] N. NAGASIMA, H. SUZUKI, K. TANAKA et S. NISHIDA, *Interaction Between Phosphosilicate Glass Films and Water*, J. Electrochem. Soc., **121**(3), pp. 434-438, 1974.
- [35] M. YOSHIMARU et H. MATSUHASHI, *Moisture Resistance of Annealed Borophosphosilicate Glass Films and Water*, J. Electrochem. Soc., **143**(9), pp. 3032-3037, 1996.

- [36] Y. HOMMA, T. FURUSAWA, H. MORISHIMA et H. SATO, *Low Permittivity Dielectrics and Global Planarization for Quarter-Micron Multilevel Interconnections*, Solid-State Electron., **41**(7), pp. 1005-1011, 1997.
- [37] C.K. CHIANG, W.E. WALLACE et G.W. LYNN, *Thermally Induced Stress Relaxation and Densification of Spin-on-Glass Thin Films*, Appl. Phys. Lett., **76**(4), pp. 430-432, 2000.
- [38] D.E. BORNSIDE, *Mechanism for the Local Planarization of Microscopically Rough Surfaces by Drying Thin Films of Spin-Coated Polymer/Solvent Solutions*, J. Electrochem. Soc., **137**(8), pp. 2589-2595, 1990.
- [39] S. HIRASAWA, Y. SAITO, H. NEZU, N. OHASHI et H. MARUYAMA, *Analysis of Drying Shrinkage and Flow due to Surface Tension of Spin-Coated Films on Topographic Substrates*, IEEE Trans. Semiconduct. Manufact., **10**(4), pp. 438-444, 1997.
- [40] G.W. SCHERER, *Effect of Drying on Properties of Silica Gel*, J. Non-Crystalline Solids, **215**, pp. 155-168, 1997.
- [41] P. LEDUC, *Etudes des Contraintes Mécaniques dans les Edifices d'Interconnexions d'un Procédé Submicronique*, Thèse de doctorat, USTL, 1999.
- [42] T. HOFFMANN, V. SENEZ et P. LEDUC, *Adsorption/Desorption Phenomena in Silicate Glasses: Modeling and Application to a Sub-Micron BiCMOS Technology*, MRS, **594**, 1999 (à paraître).
- [43] H. MIURA, H. OHTA, N. OKAMOTO et T. KAGA, *Crystallization-Induced Stress in Silicon Thin Films*, Appl. Phys. Lett., **60**(22), pp. 2746-2748, 1992.
- [44] S. ROJAS, A. MODELLI et W.S. WU, *Properties of Silicon Dioxide Films Prepared by Low-Pressure Chemical Vapor Deposition from Tetraethylorthosilicate*, J. Vac. Sci. Technol. B, **8**(6), pp. 1177-1184, 1990.
- [45] H. MIURA et A. NISHIMURA, *Effect of Phosphorus Doping on Crystallization-Induced Stress of Silicon Thin Films*, JMSE Int. J., **39**(4), pp. 620-625, 1996.
- [46] L. VEGARD, Z. Phys., **5**, p. 17, 1921.
- [47] L. PAULING, *The Nature of the Chemical Bond*, Table 7-13, Cornell University Press, Ithaca, New York, 1960.
- [48] B. LEROY, *Dislocations in Silicon Based Heterostructures*, Solid State Phenomena, **35-36**, pp. 263-280, 1994.
- [49] F.H. HORN, *Densitometric and Electrical Investigation of Boron in Silicon*, Phys. Rev., **97**, pp. 1521-1525, 1955.
- [50] B.E. DEAL et A.S. GROVE, *General Relationship for the Thermal Oxidation of Silicon*, J. Appl. Phys., **36**(12), p. 3770, 1965.
- [51] P. FORNARA, *Modélisation et Simulation Numérique de la Croissance des Siliciures pour la Microélectronique*, Thèse de doctorat, INPG, 1996.
- [52] B. BACCUS, D. COLLARD, P. FERREIRA, T. HOFFMANN, E. LAMPIN, V. SENEZ et E. VANDENBOSSCHE, *IMPACT 4.9: User's guide*, 1998.

- [53] DIOS_{ISE}, ISE TCAD Release 6.0, 1999.
- [54] ATHENA, SILVACO International Version 3.0, 1995.
- [55] C.S. RAFFERTY, *Stress Effets in Silicon Oxidation-Simulation and Experiments*, Thèse de doctorat, Stanford, 1989.
- [56] E.P. EERNISSE, *Stress in Thermal SiO₂ during Growth*, Appl. Phys. Lett., **35**, pp. 8, 1979.
- [57] E. KOBEDA et E.A. IRENE, *In Situ Stress Measurements during Thermal Oxidation of Silicon*, J. Vac. Sci. Technol. B, **6**, p. 574, 1988.
- [58] C.-L. YU, P.A. FLINN et J.C. BRAVMAN, *In-Situ Stress Measurements during Dry Oxidation of Silicon*, Mat. Res. Soc. Symp. Proc., **473**, pp. 95-100, 1997.
- [59] K. GARIKIPATI, V.S. RAO, M.Y. HAO, E. IBOK et I. DEWOLF, *Modelling and Validation of Contributions to Stress in the STI Process Sequence*, Comp. Model. Sim. Eng., **1**, 2000.
- [60] T.J. DELPH, *Intrinsic Strain in SiO₂ Thin Films*, J. Appl. Phys., **83**(2), pp. 786-792, 1998.
- [61] D.-B. KAO, J.P. MCVITTIE, W.D. NIX et K.C. SARAWAT, *Two-Dimensional Thermal Oxidation of Silicon-1. Experiments*, IEEE. Trans. Electron Dev., **34**(5), p. 1008, 1987.
- [62] D.-B. KAO, J.P. MCVITTIE, W.D. NIX et K.C. SARAWAT, *Two-Dimensional Thermal Oxidation of Silicon-2. Modeling Stress Effects in Wet Oxides*, IEEE. Trans. Electron Dev., **35**(1), p. 25, 1988.
- [63] T. TAMURA, N. TANAKA, M. TAGAWA, N. OHMAE et M. UMENO, *Effects of External Stresses on the Low-Temperature Thermal Oxidation of Silicon*, Jpn. J. Appl. Phys., **32**, pp. 12-16, 1993.
- [64] J.-Y. YEN et J.-G. HWU, *Enhancement of Silicon Oxidation Rate Due to Tensile Mechanical Stress*, Appl. Phys. Lett., **76**(14), pp. 1834-1835, 2000.
- [65] A. MIHALYI, R.J. JACCODINE et T.J. DELPH, *Stress Effects in the Oxidation of Planar Silicon Substrates*, Appl. Phys. Lett., **74**(14), pp. 1981-1983, 1999.
- [66] S. CEA, *Multidimensional Viscoelastic Modeling of Silicon Oxidation and Titanium Silicidation*, Thèse de doctorat, Univ. of Florida, 1996.
- [67] F.M. D'HEURLE et R. GHEZ, *Thin Solid Films*, **215**, p. 26, 1992.
- [68] K. MAEX, *Silicides for Integrated Circuits: TiSi₂ and CoSi₂*, Materials Science and Engineering, **R11**, pp. 53-153, 1993.
- [69] S.C. CHEN, H. TAMURA, T. HARA, K. KINOSHITA, K. INOUE, N. ENDO et S. NAKAMURA, *Silicidation Reaction and Stress in Ti/Si*, Jpn. J. Appl. Phys., **31**(2A), p. 201, 1992.
- [70] F.M. D'HEURLE, *Materials Properties of Silicides for VLSI Technology*, Solid State Devices, pp. 213-241, P. Balk and O.G. Folberth Eds., The Netherlands, 1986.
- [71] D.-B. KAO, M. MANLEY, C. BLAIR et G. SCOTT, *Two-Dimensional Effects in Titanium Silicidation*, IEEE Trans. Electron Dev., **ED-45**(1), pp. 187-193, 1998.

Chapitre V : CALIBRATION ET VALIDATION

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 validation et/ou une calibration de ces modèles. Différents paramètres entrant dans la formulation des modèles exposés doivent ainsi être ajustés.

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...

La méthodologie de calibration adoptée ici repose sur deux axes. Tout d'abord une calibration indirecte des contraintes est menée à partir de photographies MEB ou MET spécifiques (ex: croissance d'oxydes de champ ou de siliciures, pour lesquels les contraintes affectent la cinétique). Ensuite, une confrontation directe des niveaux de contraintes calculées à partir de mesures globales (déflexion de plaque) ou locales (spectroscopie micro-Raman) permet une calibration plus précise de ces modèles.

V.1 Densification des oxydes déposés

V.1.1 Calibration des phénomènes d'absorption/évaporation d'eau

La plupart des matériaux utilisés en microélectronique peuvent subir une évolution structurale après dépôt suivant une variation en température ou des interactions avec l'atmosphère. Il est notamment observé que les films d'oxyde fortement dopés présentent une instabilité relative à l'humidité ambiante [1]. Ce phénomène peut avoir des répercussions sur les performances électriques des composants (ex: création de charges positives à l'interface Si/SiO₂ par rupture de liaisons contraintes Si-O-Si [2]).

Le modèle d'absorption/évaporation d'eau présenté au chapitre précédent est appliqué pour quantifier les contraintes induites par ce phénomène.

V.1.1.1 Absorption d'eau

Afin de calibrer la cinétique d'absorption de l'eau des oxydes, l'évolution des contraintes

sur une longue période de stockage après dépôt est mesurée (figure V.1) [3]. Trois oxydes aux dopages différents sont considérés pour cette étude: un film BPSG déposé par APCVD (0.3µm d'épaisseur), un film PSG déposé par PECVD (0.25µm d'épaisseur), et un film USG (i.e., oxyde non dopé) déposé par PECVD (0.625µm d'épaisseur) [4]. Le stockage est effectué à température constante (25°C), avec un taux d'humidité contrôlé (50%).

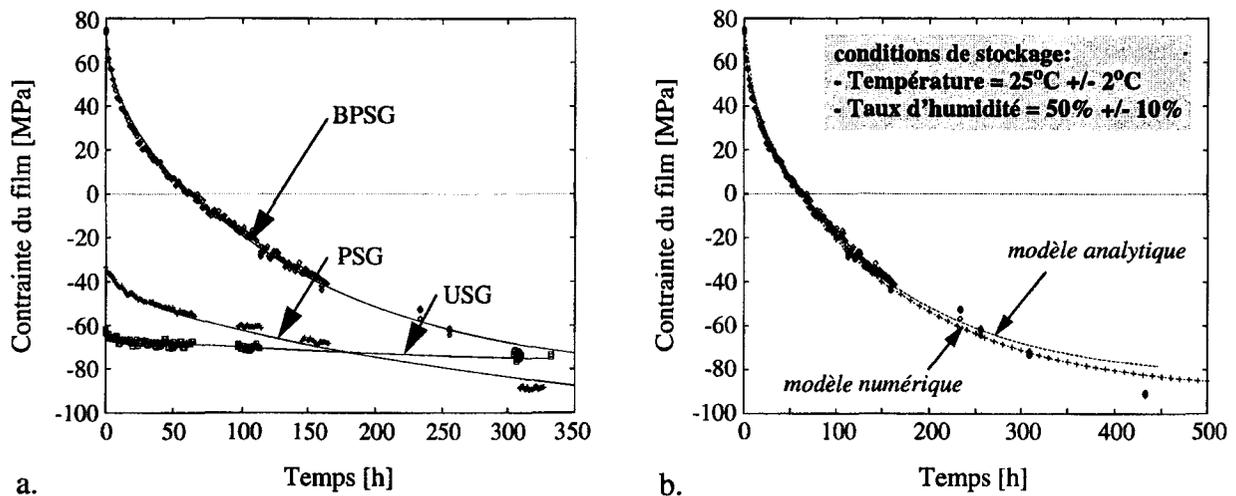


Figure V.1: Evolution des contraintes, en fonction du temps après dépôt et à température ambiante, pour des films d'oxydes CVD (USG, PSG et BPSG) [3] (a); calibration des modèles analytique et numérique pour le film de BPSG (b).

Les films ayant des caractéristiques différentes (épaisseur, composition et processus de dépôt), la contrainte initiale peut être soit en tension (BPSG), soit en compression (PSG et USG). On retrouve là un des effets des conditions de dépôt sur les contraintes intrinsèques, à savoir que le bombardement ionique propre à la technique PECVD génère des contraintes compressives.

Quel que soit le film, la contrainte devient de plus en plus compressive pendant le stockage. Cette tendance est caractéristique d'un phénomène d'absorption (en l'occurrence, l'absorption d'humidité de l'air ambiant) [5]. A partir d'un modèle analytique considérant une diffusion de l'eau suivant une loi de Fick, comme le modèle que nous avons établi, McInerney a exprimé l'évolution de la contrainte moyenne du film $\sigma(t)$ pendant son stockage [5]:

$$\sigma(t) = \sigma_0 - \Delta\sigma \left\{ 1 - \frac{8}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^2} \exp\left[-\left(\frac{\pi(2n-1)}{2t_f}\right)^2 \cdot D_{(25^\circ\text{C})} \cdot t\right] \right\} \quad (\text{V.1})$$

où σ_0 est la contrainte initiale, $\Delta\sigma$ la variation de contrainte entre $t = 0$ et ∞ , t_f l'épaisseur du film, et $D_{(25^\circ\text{C})}$ la diffusivité de l'eau à température ambiante. A partir des points de mesure, on calcule numériquement cette diffusivité pour chaque oxyde par une minimisation de l'erreur quadratique au sens des moindres carrés. Les résultats de la régression sont représentés en lignes continues à la figure V.1.a.

Une fois la diffusivité de l'eau de ces oxydes connue, le modèle numérique que nous avons décrit au chapitre précédent est appliqué, et son ajustement par rapport aux mesures permet d'extraire la concentration en surface CWS (équation (IV.39)). Une contrainte résiduelle est

fixée pour chaque film au début des simulations pour obtenir la contrainte initiale σ_0 . A titre d'exemple, la figure V.1.b montre l'ajustement des modèles sur les mesures pour le film d'oxyde BPSG. Les paramètres calibrés pour les différents films sont donnés au tableau V.1. On constate que l'effet du dopage du film sur la diffusivité est faible. Par contre, la variation totale de contrainte ($\Delta\sigma$) et la concentration en surface (CWS) sont des critères plus significatifs pour quantifier la susceptibilité du film à adsorber de l'eau. Ces deux paramètres augmentent de manière significative en fonction du niveau de dopage. Concernant la concentration en surface CWS, les valeurs extraites en fonction du dopage sont en accord avec les expériences de Yoshimaru [6] et Nagasima [7]. Néanmoins, les concentrations en surface extraites pour ces deux études sont près d'un ordre de grandeur supérieures aux nôtres, car les mesures ont été effectuées en imposant une vapeur saturée en eau à 120°C.

Tableau V.1: Caractéristiques d'absorption de quelques oxydes CVD à température ambiante.

caractéristique du film	USG	PSG (4.0%P)	BPSG (2.2%B, 5.9%P)
σ_0 [MPa]	-63.2	-31.5	74.4
$\Delta\sigma$ [MPa]	12	110	159
t_f [μm]	0.250	0.625	0.300
D [cm^2/s]	3.3×10^{-16}	5.9×10^{-16}	7.0×10^{-16}
CWS [cm^{-3}]	1.3×10^{19}	1.3×10^{20}	2.2×10^{20}

V.1.1.2 Evaporation d'eau

Des traitements thermiques après de longues périodes de stockage permettent de quantifier les mécanismes d'évaporation de l'eau emmagasinée. La dépendance en température des contraintes des films d'oxyde CVD est extraite à partir de mesures *in-situ* de déflexion de plaque pendant des cycles thermiques dans la gamme [25°C-500°C] (+/- 15°C/min) [3]. L'oxyde non-dopé (USG) n'absorbant que très peu d'humidité, son évaporation d'eau n'est pas étudiée par la suite.

Les figures V.2.a et V.2.b montrent l'évolution des contraintes lors de deux cycles thermiques successifs pour les films de BPSG et de PSG, après un longue période de stockage après leur déposition (500h pour le BPSG et 1500h pour le PSG). En conséquence, les films sont initialement saturés en eau et la contrainte initiale est nettement compressive dans les deux cas. Durant le premier cycle chauffage/refroidissement, la courbe contrainte-température présente une hystérésis marquée, qui disparaît aux cycles suivants.

Dans l'absolu, la contrainte mesurée $\sigma(T)$ est la somme de trois composantes distinctes:

$$\sigma(T) = \sigma_{\text{int}} + \sigma_{\text{therm}}(T) + \sigma_{\text{ext}}(T) \quad (\text{V.2})$$

où σ_{int} est la contrainte intrinsèque du film (i.e., à la température de dépôt), $\sigma_{\text{therm}}(T)$ est la contrainte thermique provenant de la différence des coefficients de dilatation du film et du

substrat, et $\sigma_{ext}(T)$ représente la composante extrinsèque de la contrainte tenant compte des phénomènes d'absorption/évaporation.

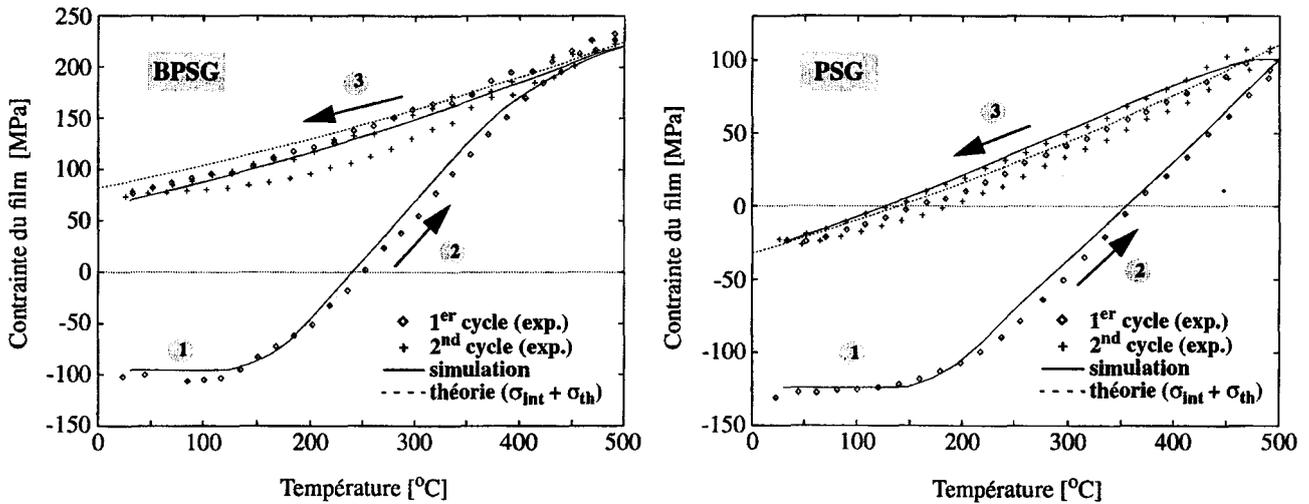


Figure V.2: Evolution des contraintes en température pour un film de BPSG après 500h de stockage (a), et un film de PSG après 1500h de stockage (b).

A la figure V.2, on observe que les premiers cycles des deux films peuvent être scindés en trois régimes distincts. Pour la région 1 ($T \leq 120^\circ\text{C}$ à la première montée en température), la contrainte ne devrait faire intervenir que les composantes intrinsèques et thermiques, car l'énergie fournie au système reste insuffisante pour évacuer l'eau incorporée dans le film. Néanmoins, aucune variation de contrainte n'est observée pour cette région. On interdit toute variation de contrainte pour cette région dans le modèle. Ce phénomène a déjà été observé par d'autres auteurs mais aucune explication claire n'a encore été donnée [8,9].

Au delà de 120°C (région 2), le processus d'évaporation est enclenché. La pente $d\sigma/dT$ augmente et reste constante au delà de 200°C , jusqu'à ce que le film ait complètement évacué son eau (à $\sim 420^\circ\text{C}$ pour le BPSG, tandis qu'il reste toujours de l'eau à 500°C pour le PSG). Cette pente $d\sigma/dT$ est principalement gouvernée par la diffusivité de l'eau des films $D(T)$. La vitesse initiale d'évaporation ($120\text{-}160^\circ\text{C}$) est fonction du coefficient d'évaporation $h(T)$ (équation (IV.40)). Ceci étant, une calibration uniquement sur la portion d'évaporation des cycles n'est pas suffisante, car plusieurs jeux de coefficients ($D(T)$, $h(T)$) peuvent être obtenus. Des mesures complémentaires d'évolution des contraintes en fonction du temps à plusieurs températures permettraient de calibrer séparément ces deux coefficients, comme cela a été fait par McInerney [5].

Des lois d'Arrhenius sont supposées pour les deux coefficients $D(T)$ et $h(T)$:

$$D(T) = D_0 \exp\left(-\frac{D_e}{kT}\right) \quad \text{et} \quad h(T) = h_0 \exp\left(-\frac{h_e}{kT}\right) \quad (\text{V.3})$$

Les résultats de calibration obtenus pour les trois films étudiés sont donnés au tableau V.2. On note que les coefficients d'évaporation présentent une faible dépendance en fonction du dopage des films. Pour les coefficients de diffusion, l'énergie d'activation calculée de 0.36-0.37eV est proche de celle extraite par McInerney (0.43eV) [5].

L'énergie d'activation élevée des coefficients d'évaporation s'explique par le fait que

l'évaporation ne déclenche lentement à basse température lors de la transition région1/région2 (i.e., $h(T) \ll$), le processus étant par contre limité par la diffusion de l'eau dans le film à la région 2 (i.e., $h(T) \gg$).

Tableau V.2: Caractéristiques d'évaporation de quelques oxydes CVD.

paramètre du modèle	USG	PSG (4.0%P)	BPSG (2.2%B, 5.9%P)
D_0 [cm ² /s]	5.1×10^{-10}	9.5×10^{-10}	1.15×10^{-9}
D_e [eV]	0.37	0.36	0.37
h_0 [cm/s]	-	6.5×10^4	3.3×10^4
h_e [eV]	-	1.2	1.1

Une fois que le film a évaporé toute son eau, la contrainte se réduit aux composantes thermique et intrinsèque lors de la descente en température (région 3). A ces températures, l'oxyde possède un comportement élastique. Cela se traduit par une variation quasi-linéaire de la contrainte lors des montées et descentes en température (i.e., plus d'hystérésis):

$$\sigma(T) = \sigma_{\text{int}} + \left(\frac{E_f}{1 - \nu_f} \right) [\alpha_s(T) - \alpha_f(T)] (T - T_d) \quad (\text{V.4})$$

où E_f et ν_f sont respectivement le module d'Young et le coefficient de Poisson du film; $\alpha_s(T)$ et $\alpha_f(T)$ sont les coefficients de dilatation thermique du substrat et du film; et T_d est la température de dépôt du film. Les valeurs des coefficients de dilatation thermique des matériaux sont ceux donnés au tableau III.1. Les propriétés mécaniques des oxydes CVD sont supposées identiques [10]: $E_f = 77 \text{ GPa}$ et $\nu_f = 0.20$. Les mesures des contraintes intrinsèques des films sont de +80 MPa ($T_d = 400^\circ\text{C}$) pour le PSG, et de +190 MPa ($T_d = 450^\circ\text{C}$) pour le BPSG. Les variations de la contrainte théorique donnée par l'équation (V.4) sont également représentées à la figure V.2. On peut remarquer que les contraintes calculées par le modèle numérique sont en accord avec les mesures et avec la variation théorique. Cela confirme le comportement élastique des oxydes dans cette gamme de températures.

V.1.2 Calibration de la densification

V.1.2.1 Oxydes CVD

L'absorption d'eau semble être un phénomène réversible n'entraînant pas de modification majeure dans la structure amorphe SiO_2 pure ou faiblement dopée. Mais le fait de dépasser la température de dépôt modifie la structure interne du matériau. Il est donc intéressant de se pencher sur les effets de la densification.

L'effet d'un recuit thermique sous atmosphère neutre n'est étudié ici que pour le BPSG, les résultats étant très similaires pour le PSG. La figure V.3.a compare l'évolution des contraintes d'un film de BPSG en fonction du temps juste après dépôt, et après trois cycles

thermiques (entre 25°C et 500°C) réalisés après un stockage de 500h. La légère densification qu'apporte ces traitements thermiques ne modifie pas les propriétés mécaniques du film: aucune variation significative de l'épaisseur et de l'indice de réfraction n'a été constatée à la suite de ce traitement [3]. Celui-ci demeure néanmoins suffisant pour déshydrater complètement le film (i.e., la contrainte initiale reste la même à environ +75 MPa pour les deux séries de mesures). Pourtant, une réduction notable de la susceptibilité à adsorber de l'eau est observée. Cela se manifeste par une réduction importante (+ 5) de la diffusivité. La stabilité du film peut donc être substantiellement améliorée par une densification à des températures relativement faibles ($\leq 500^\circ\text{C}$), compatibles avec une structure d'interconnexions d'alliages d'aluminium ou de cuivre.

La figure V.3.b représente la dilatation (calculée) du film de BPSG au cours du stockage pour les deux cas considérés. La stabilité du film densifié est confirmée par la réduction de sa vitesse d'expansion.

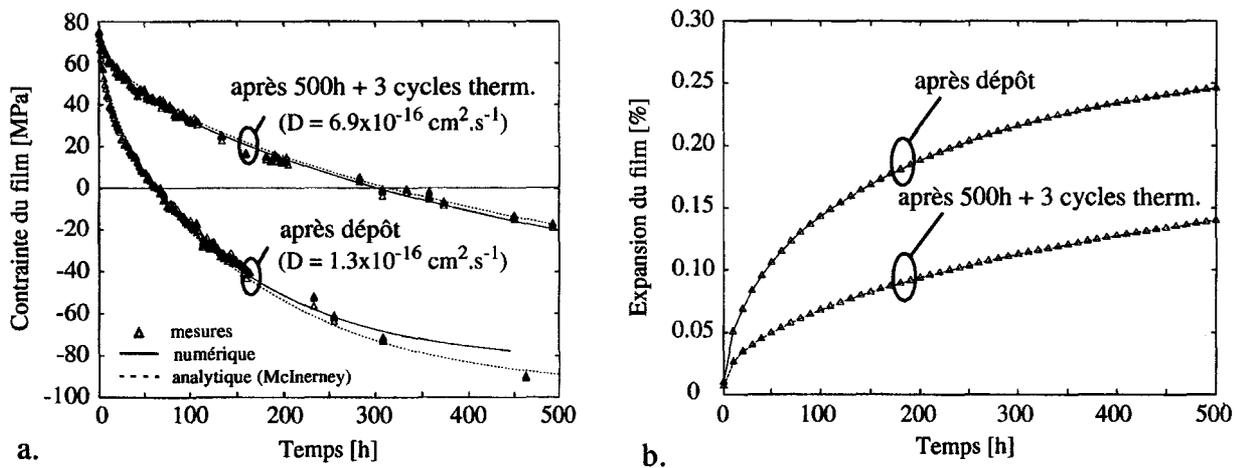


Figure V.3: Influence de la densification sur l'absorption d'un film de BPSG; évolution de la contrainte du film après dépôt et après un stockage suivi de 3 cycles thermiques (a); expansion du film dans les deux cas (b).

V.1.2.2 Oxydes SOG

La densification d'un matériau pelliculé à température ambiante comme le SOG induit des modifications structurales nettement plus marquées que les oxydes CVD. Le SOG analysé ici est un silicate commercial (P114A) [3]. Immédiatement après pelliculage, le film est soumis à trois recuits "doux" (*soft-bake*) par des expositions de 2 min. sur des plaques chauffantes à 100, 200 et 300°C. La densification est complétée par un recuit à 450°C (30 min.) dans un four sous atmosphère d'azote. L'évolution des spectres infrarouges par transformée de Fourier FTIR (*Fourier Transform Infrared*), au cours des traitements thermiques, est représentée à la figure V.4.

Le spectre dans la gamme $[2700 - 4000\text{cm}^{-1}]$, représenté à la figure V.4.a, révèle que seule la structure de la couche '100°C' présente des pics à 2950cm^{-1} et 2990cm^{-1} caractéristiques des liaisons ($-\text{CH}_X$). Il reste donc des traces de solvants aux faibles températures d'exposition. Mais le pic à 3355cm^{-1} caractéristique des liaisons silanols liées par une liaison hydrogène diminue fortement en fonction de la température.

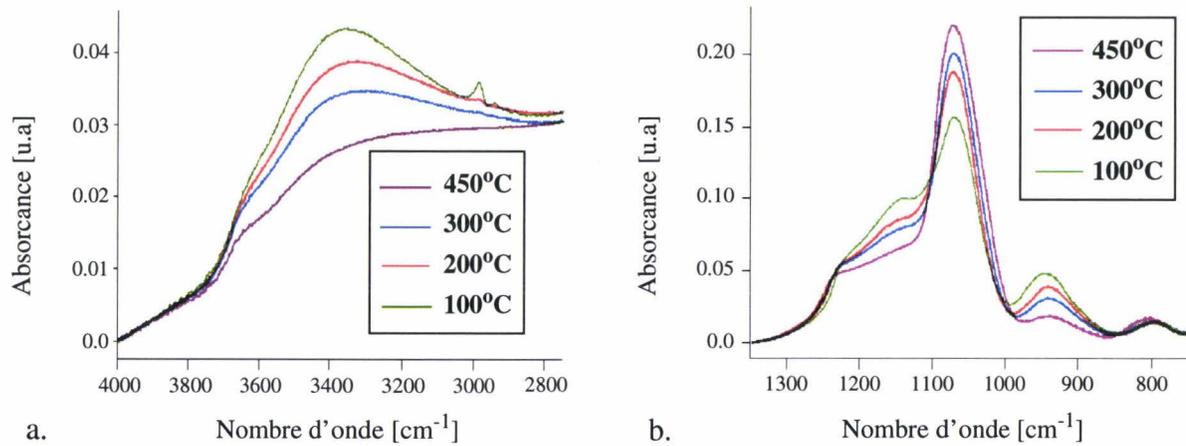


Figure V.4: Comparaison des spectres infrarouges d'un silicate (SOG) en fonction de la température maximale de densification [3]; gamme [2700 - 4000 cm^{-1}] (a) et gamme [700 - 1400 cm^{-1}] (b).

L'augmentation très significative du nombre de liaisons Si-O-Si qui absorbent par étirement à 1075cm^{-1} (figure V.4.b) confirme le fait que la structure devient de plus en plus réticulée. Par ailleurs, la mesure du degré de densification est donnée par le rapport des pics à 1075cm^{-1} et 1150cm^{-1} (ce dernier correspond à l'étirement déphasé de l'oxygène au sein du tétraèdre SiO_4). On constate que plus la température de recuit augmente, plus le degré de densification est important. L'élimination des liaisons Si-OH par évaporation d'eau est quantifiée par la diminution du pic à 940cm^{-1} .

Les phénomènes de densification sont confirmés par l'évolution de l'épaisseur des films au cours des différents traitements thermiques (figure V.5.a). Le film étant proche de l'état liquide après le pelliculage, son épaisseur n'est pas mesurable. On constate que la réduction de l'épaisseur atteint 25% après le recuit final à 450°C . Cette évolution très significative s'explique par le dégazage de l'alcool et de l'eau initialement contenus dans le film. Pour compléter la caractérisation, des échantillons de test sont retirés de la séquence des traitements thermiques aux différents paliers de température, et l'évolution de l'épaisseur de ces films à température ambiante est analysée (figure V.5.b). Les couches évoluent toutes de façon exponentielle avec le temps. Cette évolution est particulièrement notable après les faibles températures d'exposition. Par contre, la densification à 450°C stabilise complètement le film (i.e., plus d'évolution de son épaisseur).

L'ensemble de ces variations dans le temps et en température est utilisé pour calibrer le modèle d'évaporation de cette cinétique. Comme décrit au chapitre précédent, ce modèle est restreint à une seule espèce diffusante, en l'occurrence l'eau, et nous avons introduit pour cela la notion de densité effective de l'eau. La densité du SOG juste après pelliculage est de $0.83\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$. La fraction initiale en masse des composantes liquides ($\sim 95\%$) n'est plus que d'environ 50% à la fin de l'étape de pelliculage [11]. Cela constitue le point de départ pour notre modèle d'évaporation/densification. Par ailleurs, la caractérisation des films densifiés a révélé une densité de $1.85\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (indice de réfraction de 1.408). A partir de l'équation (IV.43), on peut alors extraire la densité effective de l'eau: $\rho_{\text{H}_2\text{O}}^{\text{eff}} = 0.76\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$.

Les résultats de calibration du modèle sont comparés aux mesures aux figure V.5.a et V.5.b. L'évolution en température est quantitativement bien reproduite, mais le modèle a tendance à surestimer l'amplitude des variations dans le temps. La modélisation reste cependant tout à fait satisfaisante compte tenu des importantes approximations faites (i.e., assimilation des solvants à l'eau). Les paramètres du modèle d'évaporation calibrés pour le SOG sont: $D_0 = 1.7 \times 10^{-7} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $D_e = 0.44$, $h_0 = 6.6 \times 10^{-4} \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$, et $h_e = 0.44$.

Concernant l'effet de la densité sur les paramètres du modèle que sont la diffusivité de l'eau, la viscosité du film et son module d'Young (équations (IV.45)-(IV.47)), la vitesse d'évolution a été établie à: $n = 15$. Cette calibration reste à valider compte tenu de la faible quantité de mesures par rapport au nombre élevé de paramètres du modèle.

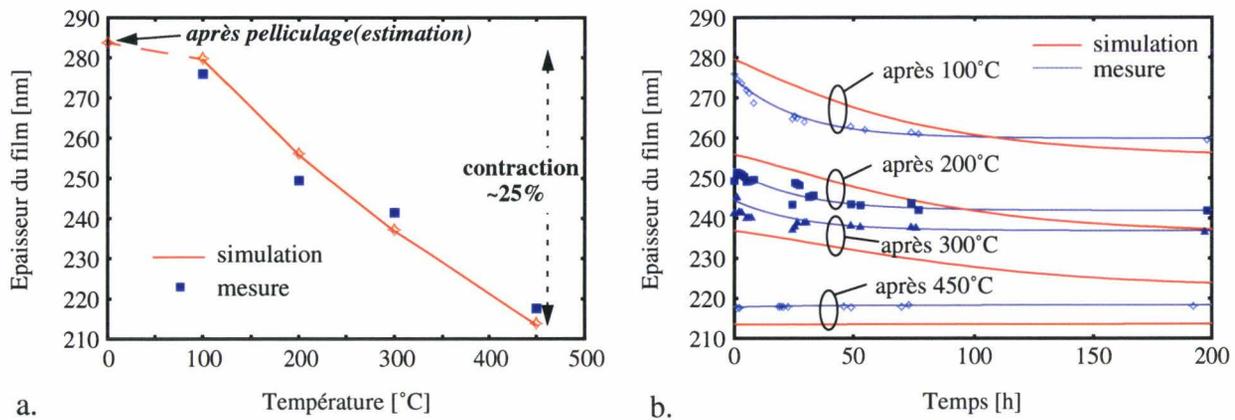


Figure V.5: Variation de l'épaisseur du film de SOG: lors des recuits de densification (a), à température ambiante à la suite de différents traitements thermiques (b).

V.1.2.3 Oxydes TEOS

Il existe d'autres types d'oxyde utilisés en production et qui présentent une instabilité relativement importante à l'humidité, nécessitant des recuits de densification: c'est le cas notamment des oxydes à base de TEOS déposés par LPCVD. De part sa composition chimique, l'oxyde TEOS est très riche en radicaux OH (sous forme de liaisons Si-OH). De plus, sa structure intrinsèquement poreuse favorise l'absorption d'humidité lors de stockages prolongés. Il n'est alors pas étonnant de retrouver des réponses en température tout à fait similaire à celles mises en évidence pour les oxydes CVD dopés, comme en témoigne la figure V.6. Ce cycle est réalisé après un stockage de 2 mois du film après son dépôt [12].

Le film d'oxyde TEOS étudié a une épaisseur de 480nm et est déposé à 700°C par LPCVD. Juste après dépôt, la contrainte résiduelle à température ambiante est de -44MPa. Après 2 mois de stockage, la contrainte devient plus compressive de part l'absorption d'humidité (~ -80MPa). De manière à calibrer le modèle d'absorption à partir de ces mesures, nous faisons une hypothèse simplificatrice: on impose une concentration initiale effective en eau pour prendre en compte la teneur en radicaux OH du film juste après dépôt ($C_0 = 2.5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$). Cette condition initiale mériterait d'être ajustée par une analyse de la composition du film déposé. On applique alors le modèle de McInerney (équation (V.1)) pour connaître la diffusivité de l'eau dans le film à température ambiante: on obtient une diffusivité sensiblement inférieure aux oxydes CVD dopés ($D = 1.7 \times 10^{-17} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$).

Un cycle thermique après le stockage de 2 mois permet d'évacuer l'eau contenue dans le film (que ce soit l'eau initialement présente ou l'eau emmagasinée dans le temps). La figure V.6.a illustre l'évolution mesurée des contraintes en température. On voit clairement apparaître l'hystérésis associée au processus d'évaporation, exactement comme pour les oxydes dopés. L'évaporation commence vers 150°C et se termine vers 600°C. Le reste de l'hystérésis ne fait intervenir que la composante thermique de la contrainte. La calibration du modèle d'évaporation permet de reproduire cette hystérésis, comme en témoigne la figure V.6.b. Les valeurs des termes préexponentiels et des énergies d'activation de la diffusivité et du coefficient d'évaporation sont respectivement: $D_0 = 3 \times 10^{-8} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, $D_e = 0.55 \text{ eV}$, $h_0 = 3.3 \times 10^4 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$, $h_e = 1.1 \text{ eV}$.

Les propriétés mécaniques du TEOS ont été calibrées en exploitant la variation linéaire élastique du film lors du refroidissement correspondant à la composante thermique de la contrainte (équation (V.4)). On peut alors extraire un jeu de paramètres calibrés pour le module d'Young (E_f), le coefficient de Poisson (ν_f) et le coefficient de dilatation thermique (α_f) du TEOS: $E_f = 75 \text{ GPa}$, $\nu_f = 0.2$, et $\alpha_f = 0.7 \times 10^{-6} / ^\circ\text{C}$. Très récemment, une caractérisation du film par spectroscopie Brillouin a validé ces deux derniers paramètres ($E_f / (1 - \nu_f) \sim 95 \pm 3 \text{ GPa}$ [12]).

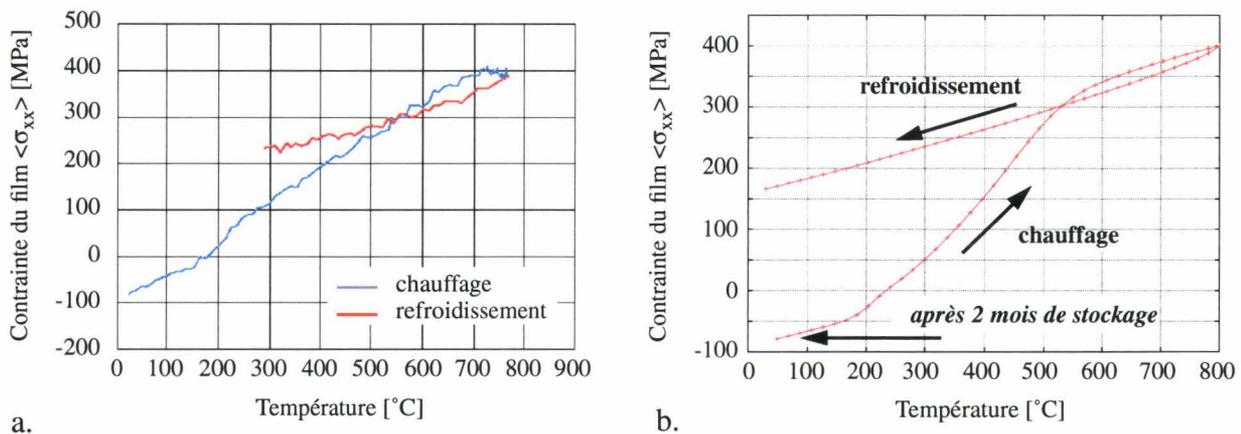


Figure V.6: Evolution des contraintes en température pour un film de TEOS après 2 mois de stockage: mesures (a); simulation (b).

Par ailleurs, on observe un croisement du cycle vers 550°C lors de la montée et de la descente en température. Ce phénomène provient d'une légère relaxation visqueuse du film aux températures les plus élevées (~800°C). La modélisation viscoélastique du matériau permet de reproduire cet effet.

On s'intéresse à présent aux phénomènes induits lors du processus de densification du film, réalisée par un recuit de 30min. à 1100°C. Comme nous venons de le voir, un traitement à haute température s'accompagne d'un écoulement visqueux de l'oxyde. Plus précisément, la chute de la viscosité au delà d'environ 1000°C relaxe considérablement les contraintes du film. Pour modéliser cet effet, nous avons utilisé les valeurs calibrées de la viscosité des oxydes thermiques [13].

L'évolution des contraintes du film de TEOS lors de sa densification est représentée à la figure V.7. Lors de la montée en température, on retrouve tout d'abord la même évolution que celle de la figure V.6 et l'on distingue plus clairement la fin du processus d'évaporation au delà

de 600-700°C. La relaxation visqueuse se manifeste pour les températures supérieures à ~900°C mais les contraintes restent significatives lorsque la température de densification est atteinte (150MPa). Néanmoins, la vitesse de relaxation étant très importante à cette température, le film se retrouve complètement relaxé après 30min. de recuit. Lors de la descente en température, les contraintes sont d'origine thermique et le film retrouve rapidement son comportement élastique. La valeur obtenue lors du retour à la température ambiante est en très bon accord avec celle mesurée (-288MPa) [12].

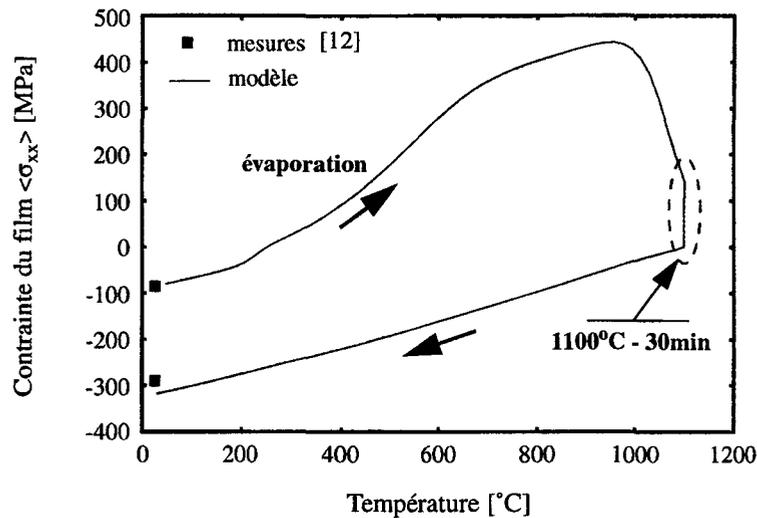


Figure V.7: Evolution des contraintes du film de TEOS lors de sa densification.

Lors de la simulation de cette densification, les propriétés mécaniques du TEOS sont considérées constantes. Cette hypothèse peut paraître simplificatrice étant donné que le film subit une relaxation complète à 1100°C, ce qui autorise une réorganisation de la structure. Néanmoins, une caractérisation du film par spectroscopie Brillouin n'a décelé qu'une légère augmentation de son module biaxial (~10%) après la densification [12].

On peut conclure de ces résultats que la densification du TEOS ne modifie pas fondamentalement sa structure, contrairement à celle des oxydes pelliculés.

V.2 Cristallisation du silicium amorphe

Pour améliorer le niveau de modélisation des contraintes générées par les films minces, les changements volumétriques lors de transition de phase doivent être considérés. Parmi ces phénomènes, nous nous intéressons plus particulièrement à la cristallisation des films minces de silicium amorphe.

Les principes du modèle ont été présentés au chapitre IV. Pour le calibrer, nous considérons les expériences de Miura [14,15]: des films de silicium amorphe de 550nm d'épaisseur sont déposés par CVD à 525°C sur des substrats (100) préalablement oxydés. Un dopage élevé en phosphore est défini, ou non, pour ces films. L'évolution des contraintes lors d'une montée en température est mesurée par déflexion de plaque et les résultats sont représentés à la figure V.8. Chaque point de mesure est obtenu après un maintien de 30 minutes

à la température considérée. La contrainte résiduelle initiale des films amorphes est d'environ 200MPa en compression et elle n'évolue pratiquement pas jusqu'à 600°C (le silicium amorphe a le même coefficient de dilatation thermique que le silicium monocristallin). Au-delà de cette température, la cristallisation se développe de manière instantanée dans le film, qu'il soit dopé ou non. Cela se manifeste par une variation de contrainte en tension d'environ 1GPa qui provient de la contraction du film (nucléation des grains). A plus haute température, les contraintes se relaxent plus ou moins rapidement selon le dopage *via* un comportement viscoélastique ou élastoplastique, voire viscoplastique. Etant donné qu'aucune évidence expérimentale ne permette de privilégier telle ou telle hypothèse concernant la loi de comportement de ces films, nous considérerons, par souci de simplification, que ces films suivent un comportement viscoélastique linéaire.

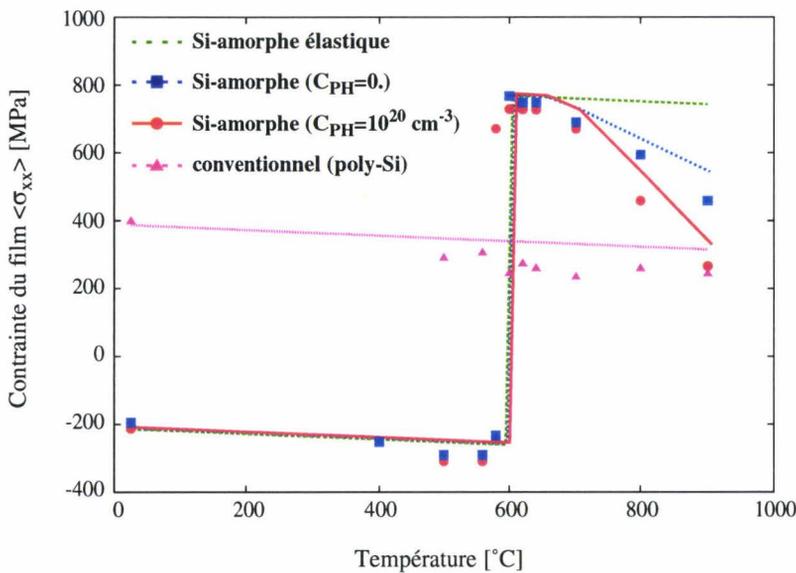


Figure V.8: Evolution en température des contraintes dans des films de silicium amorphes et polycristallins (symboles: mesures de Miura [14,15]; lignes: modèle).

A partir de la relation qui lie la contrainte biaxiale élastique d'un film mince à sa déformation ($\sigma = E/(1 - \nu) \cdot \epsilon$), Miura a extrait l'amplitude de sa contraction au moment de sa cristallisation (0.6%). Cette déformation est introduite comme une sollicitation supplémentaire dans le calcul mécanique. A cette température, les phénomènes de relaxation visqueuse des contraintes sont négligeables et l'on observe que le modèle reproduit parfaitement l'amplitude du saut de contrainte. Mais on constate à la figure V.8 que le comportement élastique ne rend pas compte de la relaxation des contraintes à haute température. Le comportement possède donc une composante visqueuse relaxante.

L'extraction de la viscosité du film de polysilicium est réalisée à partir de la relaxation des contraintes. D'après la modélisation de la viscoélasticité [13], les contraintes se relaxent exponentiellement sur un pas de temps Δt donné:

$$\sigma(t + \Delta t) = \sigma(t) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau}\right), \quad \text{avec } \tau = \frac{\eta}{G} \quad (\text{V.5})$$

où τ représente le temps de relaxation caractéristique, η est la viscosité et G est le module de rigidité du film ($G = E/2(1+\nu)$).

La contrainte thermique étant négligeable, on peut considérer que l'évolution des contraintes d'un point de mesure au suivant provient uniquement de la relaxation pendant 30 min. à température constante. Autrement dit, la contrainte du point de mesure (i+1) se calcule à partir de la contrainte du point (i) par la relation:

$$\sigma(T_{i+1}) = \sigma(T_i) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_{i+1}}\right) \quad (\text{V.6})$$

où Δt est la durée (i.e., 30 min.) du maintien à la température T_{i+1} .

On note à la figure V.8, que les contraintes n'évoluent pas après cristallisation jusqu'à environ 650°C (i.e., le silicium est toujours élastique). Cette température définit la transition entre le régime élastique et le régime visqueux et on fixe arbitrairement la viscosité à une très forte valeur pour cette température (1×10^{18} Poises). Les viscosités aux températures plus élevées sont alors calculées de proche en proche en utilisant l'équation (V.6). Les résultats pour les films dopés et non-dopés sont donnés au tableau V.3. En ajustant une loi de type Arrhenius aux hautes températures ($\geq 700^\circ\text{C}$), il serait possible d'extrapoler une valeur plus réaliste de la viscosité pour les températures plus basses ($\leq 650^\circ\text{C}$).

Tableau V.3: Calibration de la viscosité du silicium après cristallisation.

T [°C]	σ [MPa]		η [Poises]	
	non-dopé	dopé	non-dopé	dopé
650	740	740	1.0×10^{18}	1.0×10^{18}
700	700	690	2.0×10^{16}	1.6×10^{16}
800	600	470	7.0×10^{15}	3.0×10^{15}
900	480	250	5.0×10^{15}	1.8×10^{15}

Le modèle est alors appliqué pour valider cette calibration et les résultats sont représentés à la figure V.8. L'évolution des contraintes est reproduite de manière satisfaisante sur toute la plage de températures considérée.

Par ailleurs, Miura a menée la même expérience en déposant un film de silicium polycristallin *in-situ* (dépôt par CVD à 625°C). On constate à la figure V.8 que ce film reste élastique, même à haute température, avec une contrainte proche de celle obtenue après cristallisation des films amorphes (~400MPa en tension). Malheureusement, les mesures en température n'ont pas été refaites avec les films cristallisés. Ceci permettrait de conclure sur l'origine exacte de la relaxation observée juste après cristallisation.

V.3 Oxydation du silicium

Ce paragraphe s'intéresse à la calibration et à la validation du modèle d'oxydation non-linéaire viscoélastique. Une grande partie du travail de calibration de ce modèle a déjà été effectuée par Senez à partir de géométries 2D [13]. Ici, nous validerons cette calibration de manière plus quantitative à partir des contraintes induites par oxydation.

V.3.1 Oxydation plane

De manière à rendre compte de la courbure progressive des plaques lors d'oxydations planes, nous devons introduire une expansion latérale pour chaque couche d'oxyde nouvellement créée. Cette déformation intrinsèque ($\sim 5 \times 10^{-3}$, cf. §IV.3.4.2) reste très faible devant l'expansion normale au front d'oxydation (~ 2.2). Ceci étant, comme l'expansion latérale de l'oxyde est contrainte par le silicium, il en résulte des contraintes non négligeables (~ -400 MPa [16]).

Afin de reproduire correctement la relaxation des contraintes de l'oxyde thermique après sa formation, Yu propose une dépendance temporelle de la viscosité [16]. Ce modèle rend compte, en quelque sorte, d'un vieillissement de l'oxyde et l'on définit une simple dépendance linéaire dans le temps de la viscosité:

$$\eta(T, t) = \eta_0(T) + m \cdot t \quad (\text{V.7})$$

où η_0 est la viscosité initiale de l'oxyde en fonction de la température d'oxydation; t représente "l'âge" de l'oxyde, et m correspond à la vitesse de vieillissement. Ce dernier paramètre peut dépendre de la température, mais nous négligeons cette dépendance pour simplifier la calibration. A partir des résultats de Yu, sa valeur est fixée à: $m = 5.6 \times 10^{10}$ Pa.

La validation de ce modèle est réalisée à partir des mesures de contraintes tout au long de la croissance d'oxydes en ambiance sèche (O_2) à différentes températures (figure V.9.a).

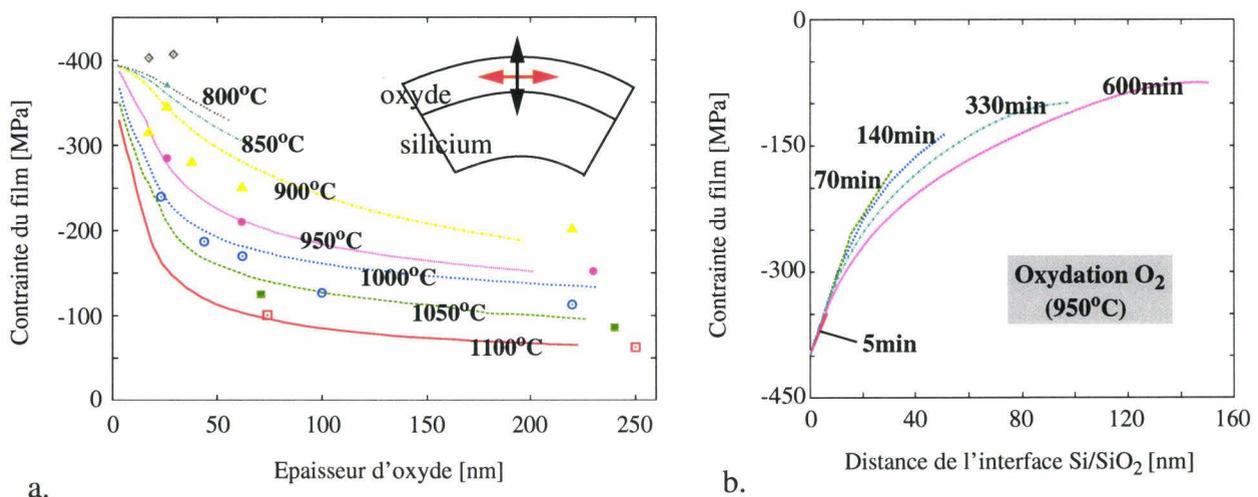


Figure V.9: Evolution des contraintes de l'oxyde lors de sa croissance à différentes températures en ambiance sèche O_2 (lignes: modèle; symboles: mesures [16]) (a); évolution du gradient de contraintes dans l'oxyde pour une croissance à 950°C (b).

La contrainte mesurée correspond à la moyenne de la contrainte totale du film. Comme

en témoigne la figure V.9.b, on constate que la contrainte à l'interface Si/SiO₂ reste constante à -400MPa, mais comme les contraintes à l'interface avec le milieu ambiant se relaxent progressivement lorsque l'oxyde croît, la valeur moyenne diminue. Les valeurs de la viscosité initiale $\eta_0(T)$ qui ont été ajustées pour calibrer le modèle à partir des mesures de Yu sont reportées à la figure V.10.a. La modification des valeurs calibrées par Senez demeure modeste. La viscosité extraite est quasiment identique à celle de Yu, mais l'énergie d'activation est légèrement inférieure aux mesures de Hetherington. D'autres facteurs que la température peuvent influencer la viscosité des oxydes (ex: traitements thermiques précédents, teneur en radicaux OH, présence d'impuretés métalliques et/ou de dopants) [17].

Le fait de considérer l'expansion latérale de l'oxyde en croissance remet en cause certaines hypothèses du modèle et plus particulièrement la formulation de l'effet des contraintes sur le coefficient de réaction à l'interface Si/SiO₂ (équation (IV.64)). En effet, il n'est plus valide de ne considérer que les contraintes normales à l'interface et une formulation similaire à celle de la diffusivité des agents oxydants (équation (IV.62)), faisant intervenir à la fois les contraintes normales et latérales, devient nécessaire:

$$k_{Si}^{(\sigma)} = k_{Si}^{(0)} \cdot \exp\left(-\frac{PV_k}{kT}\right) \quad \text{pour } P > 0 \quad (V.8)$$

Dans ce cas de figure, une recalibration de l'énergie d'activation V_k peut s'avérer nécessaire. Pour le vérifier, on évalue la différence de cinétique en considérant, ou non, l'expansion latérale à l'aide de la formule (V.8). Cette vérification est menée pour une oxydation sèche à 800°C et les résultats sont représentés à la figure V.10.b. On constate que la compression supplémentaire liée à l'expansion latérale réduit effectivement la cinétique de croissance, mais l'écart n'est que de 6% par rapport au modèle standard après 400min. d'oxydation (i.e., sans expansion latérale). On en conclut donc qu'il n'est pas impératif de recourir à une recalibration complète du modèle. Sur cette même figure, on a également reporté les mesures de Massoud [18]. Les résultats indiquent clairement que la prise en compte de l'expansion latérale ne permet pas de remédier à la limitation du modèle de Deal&Grove pour le régime initial d'oxydation.

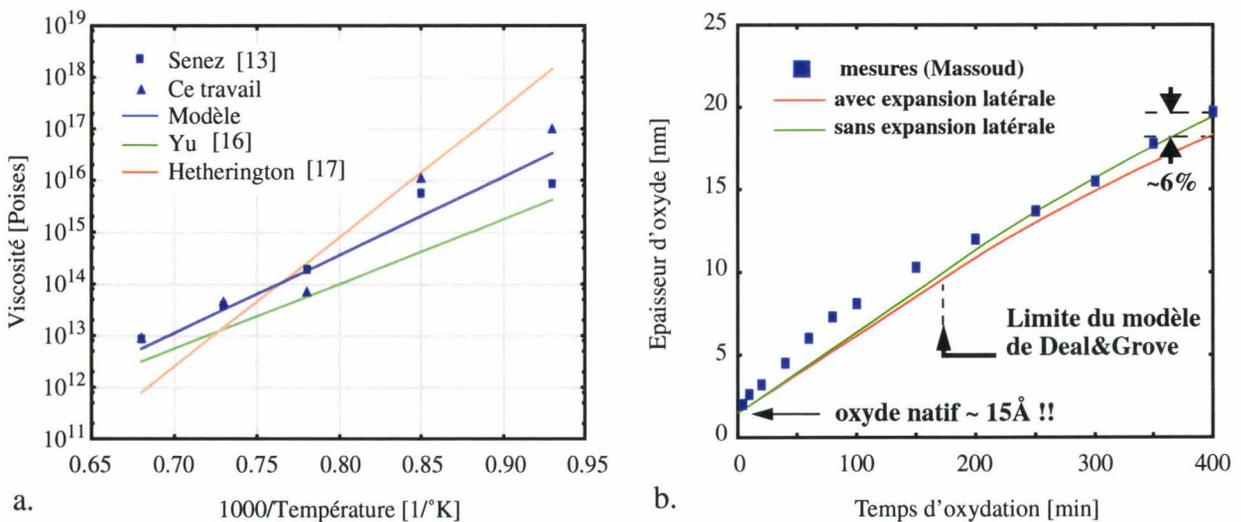


Figure V.10: Calibration de la viscosité en température (a); Effet de l'expansion latérale sur la cinétique de croissance de l'oxyde à 800°C en ambiance sèche O₂ (b).

V.3.2 Mise en évidence d'effets 3D

Pour démontrer que l'extension du modèle d'oxydation en 3D n'affecte pas la validité de sa calibration, on confronte le modèle aux expériences réalisées par Park [20]. Park a mis en évidence des effets 3D à partir de structures d'isolation de type LOCOS. Un piédestal d'oxyde de 10nm est réalisé sur des substrats vierges, avant de déposer un masque de nitrure de 150nm d'épaisseur. Après la gravure du masque pour définir les zones actives, un oxyde de champ d'environ 430nm est réalisé en ambiance humide (1000°C, 70min.). Comme illustré à la figure V.11, le nitrure est ensuite décapé et une attaque permettant de graver les 10nm du piédestal d'oxyde est ensuite effectuée.

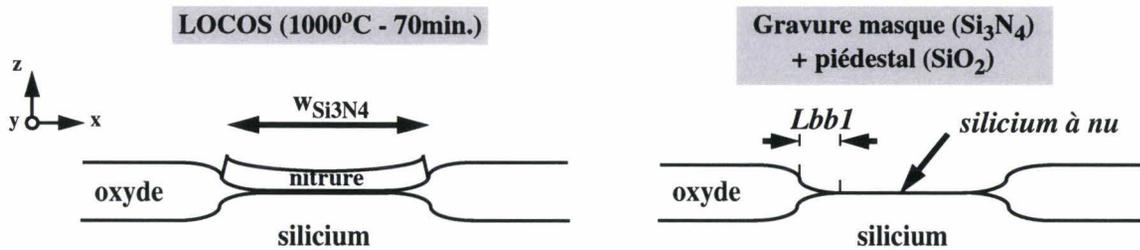


Figure V.11: Procédure expérimentale de Park [20].

Un exemple de vues du dessus (photographies MEB) est illustré à la figure V.12, pour deux largeurs de masque ($0.7\mu m$ et $0.45\mu m$). La position du silicium mis à nu par rapport aux bords du masque de nitrure permet d'évaluer les longueurs des becs d'oiseau dans deux directions orthogonales ($Lbb1$ et $Lbb2$).

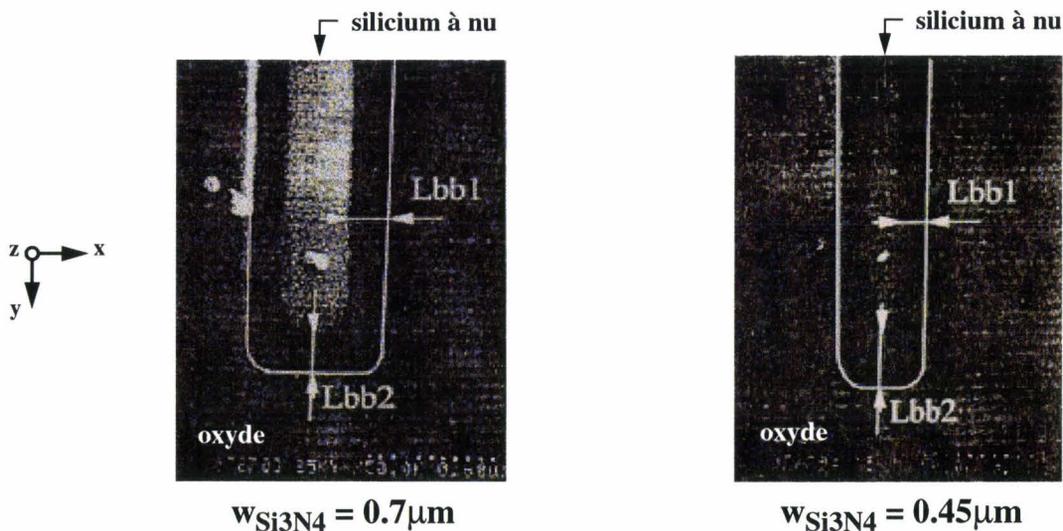


Figure V.12: Vues du dessus (MEB) des structures LOCOS après gravure du nitrure et du piédestal d'oxyde pour des largeurs de masque de $0.7\mu m$ et $0.45\mu m$ [20].

Les simulations de ces structures sont menées en prenant les valeurs calibrées en 2D du modèle d'oxydation. Pour chaque largeur de masque considérée, la longueur est considérée

constante à $2\mu\text{m}$ de même que l'ouverture de la surface oxydée. Des conditions aux limites symétriques permettent de restreindre le domaine de simulation à 1/4 de structure. La figure V.13 (a et b) représente deux résultats de géométries 3D pour des largeurs de masque de $0.7\mu\text{m}$ et $0.4\mu\text{m}$, respectivement. On peut s'apercevoir que la réduction de la largeur du masque a pour effet d'augmenter la longueur du bec d'oiseau dans la direction y (L_{bb2}), mais semble réduire légèrement celle dans la direction x (L_{bb1}). Les coupes simulées après gravure du nitrure et du piédestal d'oxyde confirment ces observations (figure V.13 a' et b'). On observe par ailleurs très distinctement l'arrondi de l'intersection Si/SiO₂, au niveau du coin du masque, qui révèle la faiblesse du masquage à ce niveau.

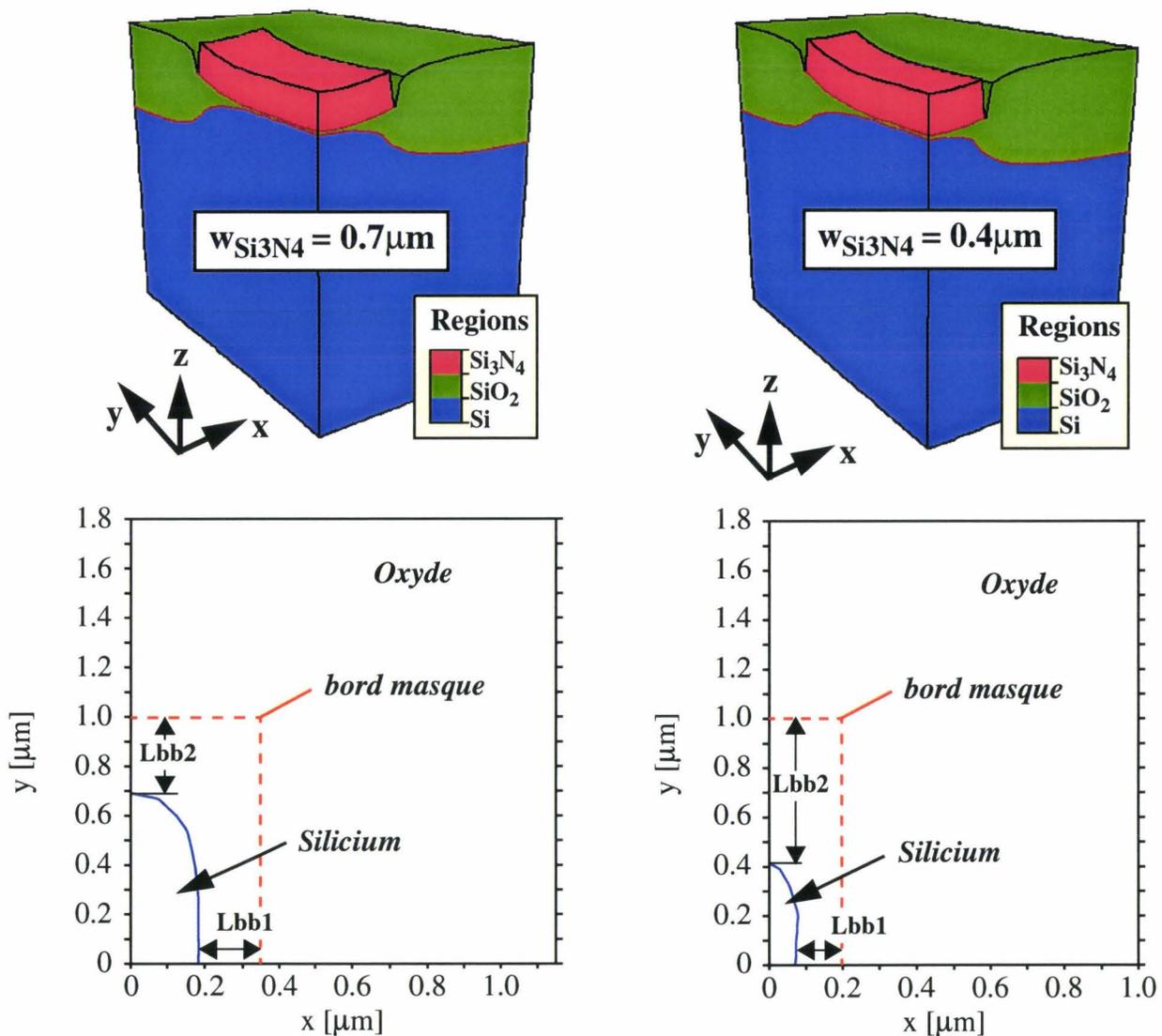


Figure V.13: Géométries 3D et coupes vues du dessus des structures de Park pour des largeurs de masque de $0.7\mu\text{m}$ (a et a') et $0.4\mu\text{m}$ (b et b').

La figure V.14 regroupe l'ensemble des résultats, expérimentaux et simulés, pour un certain nombre de largeur de masque. Dans tous les cas, il est apparu que la simulation surestime systématiquement les longueurs des becs d'oiseau. Nous avons considéré que le modèle devait être capable de reproduire quantitativement la génération des becs d'oiseau pour des largeurs de

masque suffisamment importantes: le point de référence est pris pour un large masque ($w_{\text{Si}_3\text{N}_4} = 1.8\mu\text{m}$) pour lequel il est nécessaire de graver non pas 10nm mais 16nm d'oxyde afin d'obtenir un bon accord avec la mesure (cf. figure V.14). Cette correction ne semble pas remettre en cause fondamentalement la calibration car l'erreur expérimentale reste non-négligeable. Il est en effet très difficile de contrôler précisément la gravure de 10nm d'oxyde.

En tenant compte de cette surgravure, on constate que le modèle reproduit de manière satisfaisante l'évolution des longueurs de becs d'oiseau en fonction de la largeur du masque. On constate l'augmentation très importante du bec d'oiseau Lbb2 pour les masques étroits: ce phénomène provient du déplacement du coin du nitrure, zone de masquage de plus faible efficacité, vers le milieu de la structure. L'effet de ce coin est d'autant plus sensible que le masque est étroit. Ceci étant, l'augmentation de Lbb2 s'accompagne d'une diminution de Lbb1. Ce second phénomène, moins prévisible que le premier, est lié à un effet de compensation: même à cette température, le nitrure reste beaucoup plus rigide que l'oxyde et le soulèvement des bords du masque dans la direction y provoque, par effet de levier, une force supplémentaire agissant au milieu du motif. Cette force renforce l'effet de masquage du nitrure, ce qui explique la diminution du bec d'oiseau dans la direction transverse (Lbb1).

Lorsque la largeur du masque est inférieure à environ $0.35\mu\text{m}$, il se produit un perçage de la structure et le masque de nitrure est complètement soulevé.

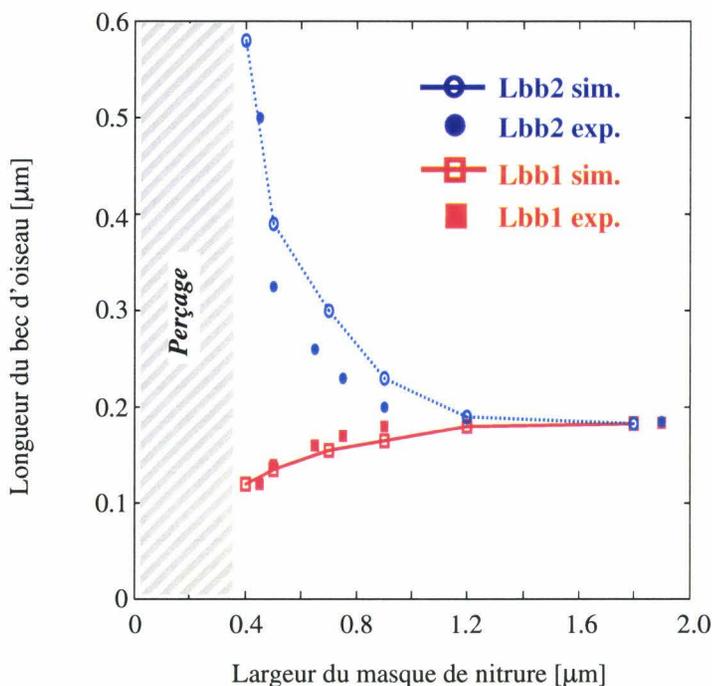


Figure V.14: Evolution des longueurs de bec d'oiseau en fonction de la largeur du masque de nitrure pour les structures de Park [20].

V.3.3 Calibration des contraintes des structures d'isolation

Nous nous intéressons à présent à la validation quantitative du calcul des contraintes générées par les étapes d'oxydation lors de la réalisation des structures d'isolation (LOCOS ou

STI). Pour ce faire, on entreprend une confrontation systématique des déviations Raman mesurées et extraites des tenseurs de contraintes calculées.

V.3.3.1 Structure LOCOS

Une photographie MET d'une structure d'isolation LOCOS typique [21], ainsi que les géométries correspondantes issues des modèles 2D et 3D, sont représentées à la figure V.15. L'oxyde de champ est réalisé par une oxydation en ambiance humide (H_2O) à $875^\circ C$. La simulation 3D est effectuée en considérant un motif suffisamment large (i.e., perpendiculairement au plan de la figure) pour respecter la condition de déformations planes considérée en 2D. Les paramètres rhéologiques des matériaux et les coefficients de la cinétique sont identiques pour les simulations 2D et 3D. Le bec d'oiseau n'est que légèrement plus pincé en 3D qu'en 2D, ce qui peut signifier un niveau de contraintes quelque peu plus important dans le premier cas. Néanmoins, l'accord est tout à fait satisfaisant et l'on peut conclure, une fois de plus, que l'extension à la troisième dimension du modèle non-linéaire viscoélastique d'oxydation ne perturbe pas sa calibration.

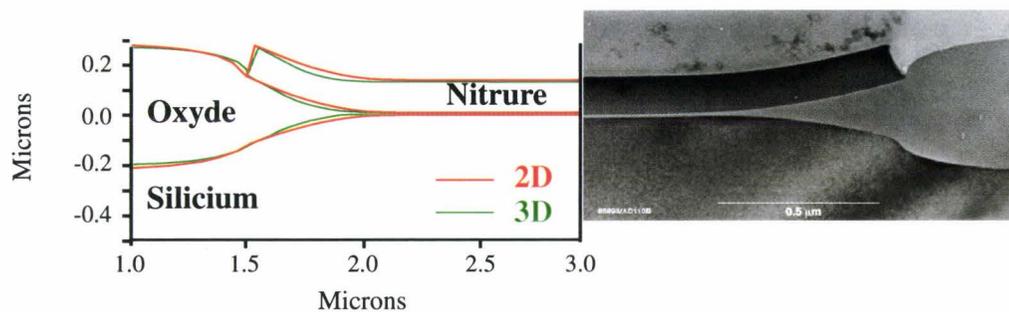


Figure V.15: Comparaison des géométries simulées (2D et 3D) avec une photographie MET d'une structure LOCOS réalisée à $875^\circ C$ - 360 min (H_2O).

Pour s'en assurer davantage, on compare les déviations Raman calculées et simulées de ce motif. Les résultats avant et après l'étape de croissance de l'oxyde de champ sont représentés à la figure V.16. Les mesures des déviations Raman sont réalisées à partir d'un laser de longueur d'onde $\lambda = 458nm$ [22]. La déviation positive sous le masque de nitrure avant l'oxydation indique un état compressif, dû à la forte contrainte intrinsèque en tension du masque. Cette contrainte est ajustée de manière à obtenir un bon accord avec les mesures ($\sigma_{nit}^{int} = 1.1GPa$). Après la formation de l'oxyde de champ, une modification substantielle du profil de déviations Raman apparaît. On observe entre autre l'apparition de deux pics en tension de part et d'autre du bord du masque séparé par un pic compressif. Le pic en tension sous le nitrure est liée à la déflexion maximale du masque en cette position. Les pics en compression et en tension restants correspondent aux oxydations sur des parties convexes et concaves du silicium, respectivement. Dans le silicium, au milieu du masque de nitrure, on constate une augmentation de la compression, après la formation du LOCOS, induite par la croissance non-verticale aux niveaux des bords du masque [21]. D'après ces résultats, on note que les modèles 2D et 3D sont à même de reproduire qualitativement les différents pics de contraintes observées. D'un point de vue quantitatif, si le modèle 2D donne des résultats satisfaisants quant à l'amplitude de ces pics, on constate une légère surestimation des contraintes en 3D, comme cela pouvait être soupçonner

aux vues des géométries (cf. figure V.15).

Pour la simulation de cette structure d'isolation, la composante de dilatation latérale de l'oxyde lors de sa croissance a été prise en compte en 2D en prenant la valeur calibrée à partir des oxydations planes ($\epsilon_{ox}^{int} = 5 \times 10^{-3}$, cf. §IV.3.4.2). Cette expansion latérale induit une contrainte en tension dans le substrat sous-jacent, juste en dessous de l'oxyde de champ. Ceci explique pourquoi les résultats du modèle 2D permettent d'obtenir un meilleur accord avec les mesures qu'en 3D, au niveau du LOCOS.

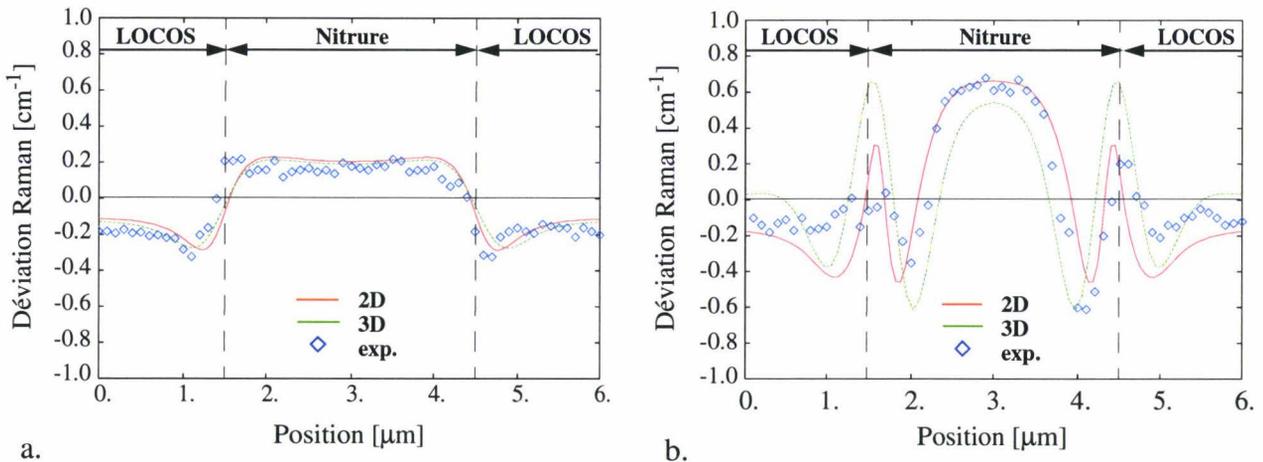


Figure V.16: Evolution des déviations Raman, simulées et mesurées, avant (a) et après (b) la croissance de l'oxyde de champ.

V.3.3.2 Structure STI

Les technologies actuellement en production ($\leq 0.25\mu\text{m}$) font de plus en plus appel à des techniques d'isolation par tranchées (STI). L'avantage principal en est le gain, en terme de densité d'intégration, lié à la transition abrupte entre zones actives et zones d'isolation.

La figure V.17.a représente la structure STI étudiée. Les principales étapes de fabrication sont les suivantes [23]: le masque d'isolation est préparé par dépôt de 200nm de nitrure (LPCVD) sur un piédestal d'oxyde de 20nm d'épaisseur; après la définition par photolithographie des zones actives, le bicouche nitrure/oxyde est gravé et des tranchées de 380nm de profondeur sont réalisées dans le substrat de silicium; les flancs des tranchées sont alors oxydés en ambiance sèche à 1050°C (~20nm), avant d'effectuer le remplissage par dépôt de 550nm d'oxyde TEOS (LPCVD); cet oxyde est ensuite densifié à 850°C en ambiance humide, ce qui a pour effet de faire croître davantage l'oxyde thermique sur les flancs des tranchées.

On peut remarquer sur la figure V.17.a que l'oxyde thermique est plus épais sur les flancs verticaux qu'au fond de la tranchée. La principale raison à cet effet est liée aux différences de vitesses d'oxydation selon les plans cristallographiques du silicium. En effet, il est prouvé que la cinétique d'oxydation est plus rapide selon les plans (111) que (110), et plus rapide selon les plans (110) que (100) [24].

Notons de plus que la simulation est à même de reproduire l'angle re-entrant du silicium au coin supérieur, comme observé sur la photographie MEB.

La figure V.17.b correspond au champ de pression hydrostatique calculée après l'étape de densification du TEOS. Toutes les sources de contraintes des différentes étapes du procédé sont considérées (contraintes thermiques, intrinsèques, d'oxydation,...). Comme pour le LOCOS, on identifie trois pics importants de contraintes: un pic en tension sous le nitrure (courbure maximale du masque), un pic en compression et un en tension correspondant respectivement au coin convexe et concave de la tranchée. Les angles sont intrinsèquement très supérieurs au cas du LOCOS, ce qui explique les niveaux élevés de contraintes obtenus ici (de l'ordre du GPa).

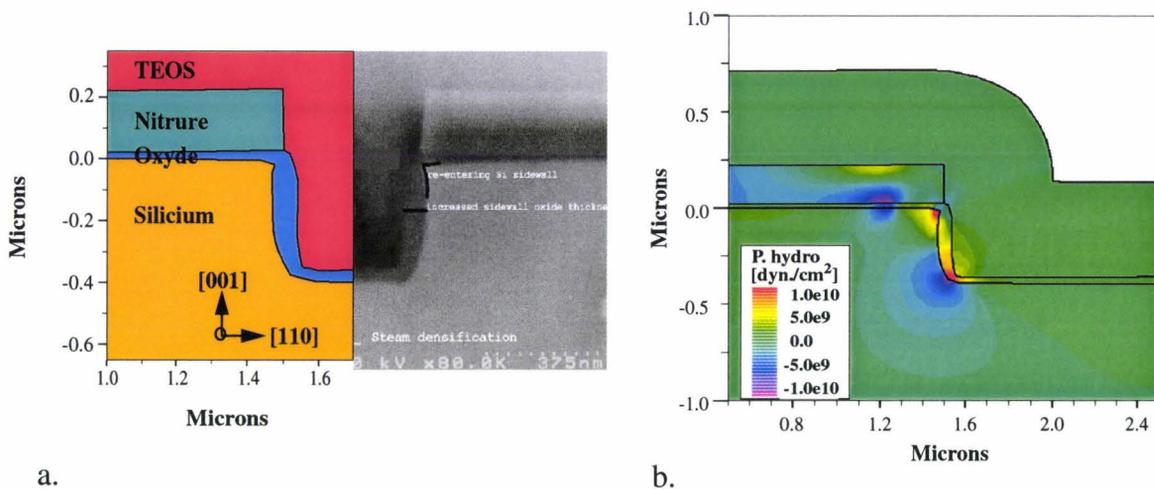


Figure V.17: Structure STI typique (simulation et photo MEB) (a); champ de pression hydrostatique à la fin de la réalisation du STI (b).

Des mesures par spectroscopie Raman à partir d'un laser fonctionnant dans la gamme UV ($\lambda = 363.7\text{nm}$) ont été effectuées pour cette structure [23]. La figure V.18 compare les déviations Raman obtenues pour cette structure par simulation et par mesure, en considérant plusieurs longueurs L du mesa de silicium de la zone active. La comparaison est réalisée après l'oxydation des flancs de la tranchée et après la densification du TEOS. Les résultats sont qualitativement identiques à ceux obtenus pour la structure LOCOS. Pour la zone active la plus large ($L = 3\mu\text{m}$), on constate l'existence d'une contrainte compressive importante dans le silicium au milieu de la structure, induite par la contrainte intrinsèque en tension du nitrure. Contrairement au LOCOS, le niveau de contrainte compressive baisse légèrement après la densification: l'effet géométrique de croissance de l'oxyde au niveau de la tranchée est négligeable. La diminution de la compression s'explique par une contraction "contrainte" du mesa de silicium, de part la présence du film de TEOS, lors de la descente en température après le dépôt de ce film. Près des bords de la tranchée, on constate l'apparition après densification du pic de compression et des deux pics de tension déjà mentionnés.

Lorsque la longueur du mesa est réduite, l'amplitude de ces pics évoluent peu. Par contre, une modification notable est observée pour les contraintes sous le nitrure. En effet, lorsque le masque devient étroit ($L = 1\mu\text{m}$), les deux pics de tension induits par sa courbure se rapprochent l'un de l'autre et annihilent la contrainte compressive existant au préalable. On constate que ce phénomène est reproduit qualitativement par la simulation.

Si l'on compare de plus près les résultats obtenus par la simulation avec les mesures, on

remarque que l'accord se dégrade lorsque L diminue. Ceci étant, pour une largeur de mesa de $1\mu\text{m}$, on approche les limites de validité de la technique micro-Raman imposées par la largeur du laser ($\sim 0.6\mu\text{m}$). L'erreur de mesure commise sur des motifs aussi étroits est difficilement quantifiable. L'analyse plus fine de ce type de structure à partir de la technique de mesure par faisceaux convergents (CBED) est en cours de réalisation (projet STREAM). Cette technique devrait palier les limitations de la spectroscopie micro-Raman pour les petites structures.

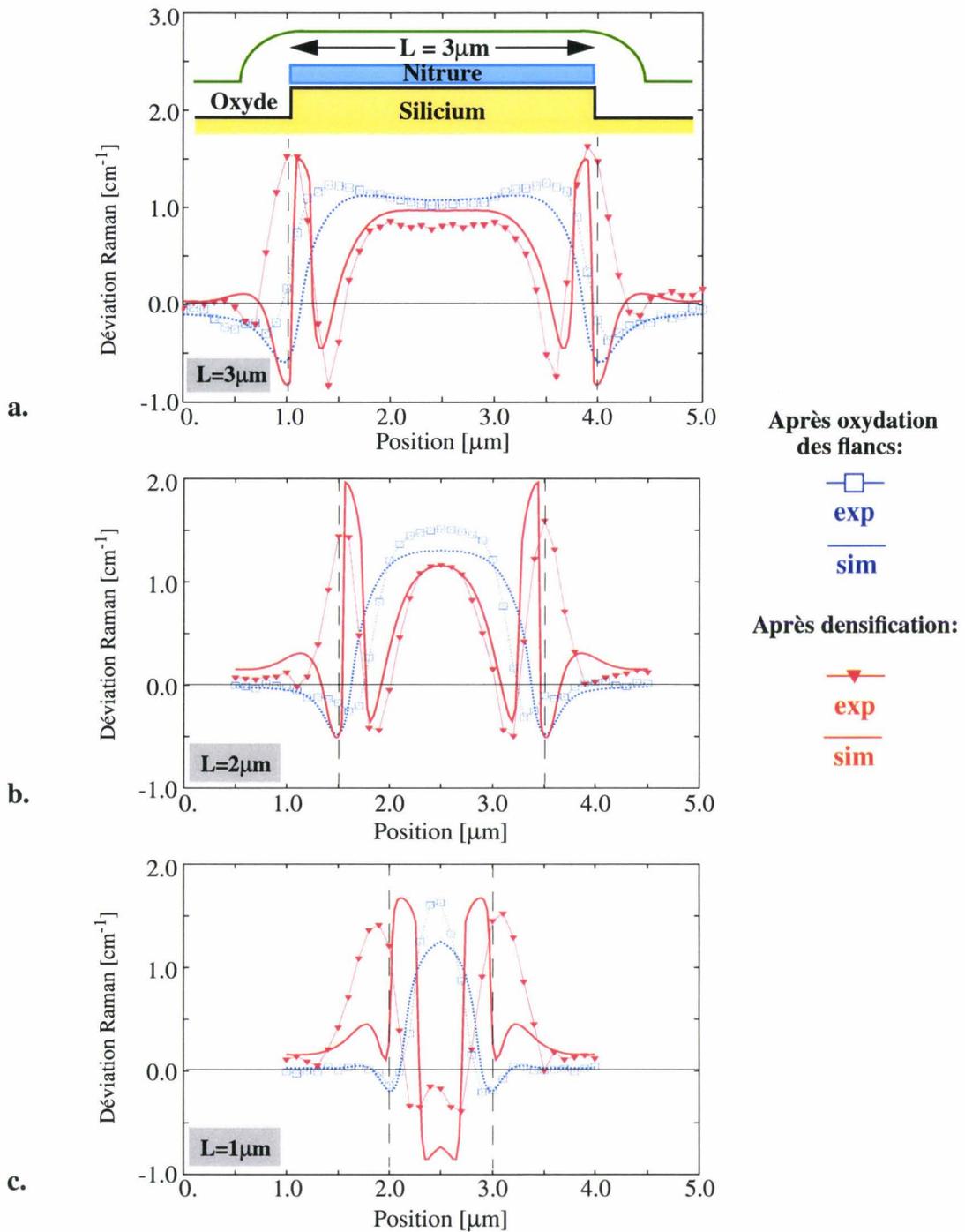


Figure V.18: Comparaison entre les déviations Raman mesurées et simulées, après oxydation des flancs et après densification, pour trois longueurs L du mesa: $3\mu\text{m}$ (a), $2\mu\text{m}$ (b) et $1\mu\text{m}$ (c). Les résultats correspondent à un laser à 363.7nm .

V.4 Siliciures

V.4.1 Cinétique du $TiSi_2$

Nous avons vu au chapitre précédent que la modélisation de la siliciuration est très semblable à celle de l'oxydation. La cinétique est basée sur l'approche de Deal&Grove et un comportement viscoélastique linéaire caractérise mécaniquement ce matériau.

En ce qui concerne la cinétique, il est observé que la croissance du $TiSi_2$ est un processus limité par la diffusion, que ce soit pour les recuits classiques [25,26], ou les recuits RTA [27]. Le régime de croissance est donc parabolique (équation (IV.57)): la figure V.19.a regroupe les valeurs du coefficient parabolique B du modèle de Deal&Grove, extraites pour un certain nombre de conditions expérimentales. Suivant la température de siliciuration, on constate que l'énergie d'activation de ce coefficient est plus importante à basse température (<650°C), qu'à haute température (>650°C). Cette constatation est à mettre en parallèle avec le fait que la phase cristalline du $TiSi_2$ est fonction de la température de croissance: à basse température est produite la phase fortement résistive C49, tandis qu'on obtient directement la phase faiblement résistive C54 à haute température. Il est donc tout à fait plausible de définir un double régime de croissance pour ce type de siliciure.

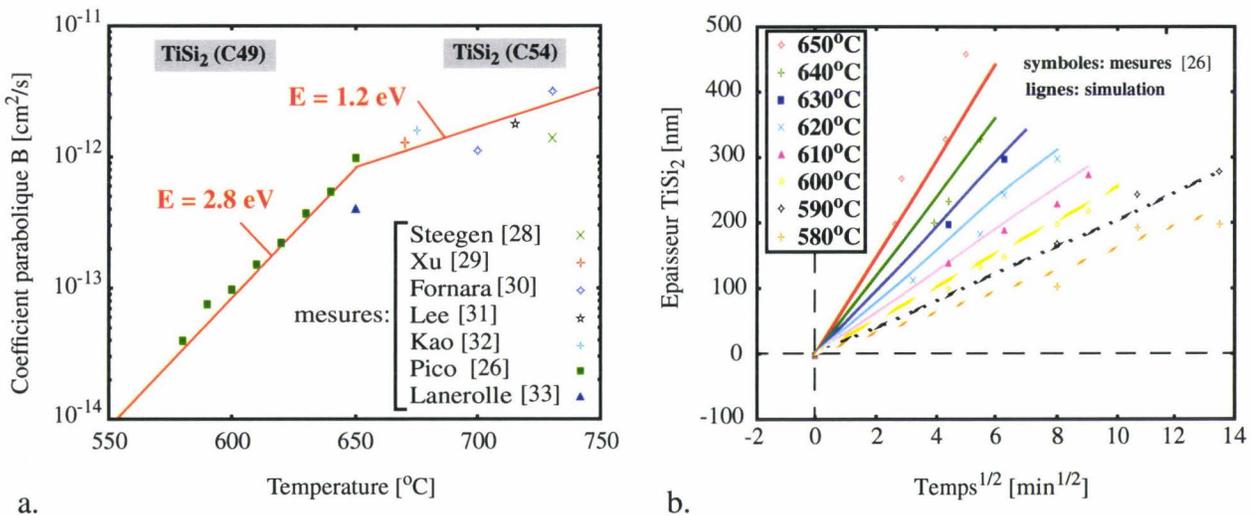


Figure V.19: Calibration du coefficient parabolique de la cinétique du $TiSi_2$ (a); évolution de l'épaisseur du $TiSi_2$ à différentes températures (b).

De manière à valider l'existence d'un régime parabolique, l'évolution de l'épaisseur du $TiSi_2$ pour différentes températures obtenue par le modèle calibrée est confrontée aux mesures de Pico (figure V.19.b) [26]. On voit clairement apparaître le régime parabolique de la réaction à toutes les températures.

Comme nous avons pu le constater pour l'oxydation, la présence de contraintes mécaniques est souvent citée comme ayant un effet sur la réaction de formation des films minces. Par analogie, nous prenons en compte dans le modèle de croissance du $TiSi_2$ les

contraintes générées dans la couche de TiSi_2 pendant sa formation. Ce type de dépendance permet de modéliser certains effets particuliers comme la non-croissance du TiSi_2 sous les espaceurs d'oxyde, illustrée à la figure V.20.a. Pour cet exemple, le siliciure est formé par un recuit rapide de 20 secondes à 730°C .

La question demeure quant au mécanisme physique responsable de ce phénomène. Certains auteurs estiment qu'il provient de l'injection d'oxygène dans le TiSi_2 , à partir de l'espaceur, qui a pour effet de bloquer la cinétique [34]. D'autres études adoptent une approche semblable à la modélisation de l'oxydation en incorporant l'effet de la pression hydrostatique sur la diffusivité des atomes de silicium (équation (IV.62)) et sur le coefficient de la réaction (équation (IV.64)) [30]. Bien qu'aucune évidence expérimentale ne l'ait encore clairement prouvé [32], nous adoptons cette seconde approche pour ce modèle.

Concernant la réaction d'oxydation, celle-ci est induite par la diffusion de l'oxygène par sites interstitiels [35], alors que la siliciuration s'opère par un mécanisme lacunaire [36]. A partir de ces observations, Fornara en conclut que la cinétique de siliciuration est ralentie dans les zones en tension [30]. Cette interprétation est cohérente avec le champ de contraintes générées par la croissance, représenté à la figure V.20.b. On observe clairement la zone de tension induite en bord d'espaceur correspondant au pincement très prononcé du TiSi_2 .

De part le nombre réduit d'expériences disponibles pour calibrer les différents coefficients du modèle, nous incorporons l'effet des contraintes uniquement sur la diffusivité effective des atomes de silicium. Nous adaptons donc l'équation (IV.62) pour une réduction de diffusivité dans les zones de tension:

$$D^{(\sigma)} = D^{(0)} \cdot \exp\left(\frac{PV_D}{kT}\right) \quad \text{pour } P < 0 \quad (\text{V.9})$$

où V_D est le volume d'activation de la réaction.

Du fait que le flux de silicium peut s'exprimer en fonction du gradient et de la diffusivité des lacunes (cf. IV.3.4.3), le volume d'activation V_D correspond donc au volume de migration de la lacune, c'est à dire au volume mis en jeu lors du saut de la lacune entre deux sites. Théoriquement, celui-ci doit être proche de la moitié du volume atomique du silicium qui est de 20\AA^3 .

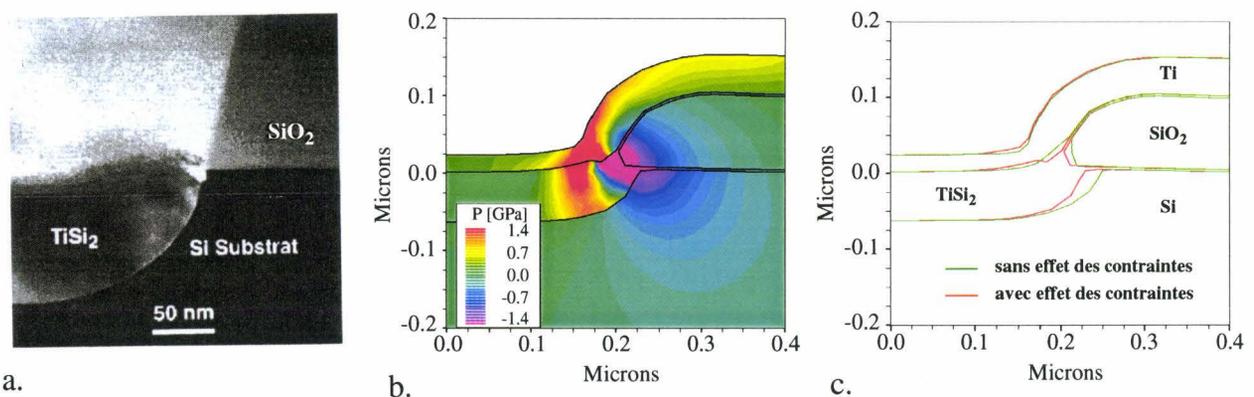


Figure V.20: Photo MET de croissance de TiSi_2 en bord d'espaceur [30] (a); champ de pression hydrostatique lors de la formation du TiSi_2 (b); effet des contraintes sur la cinétique de croissance (c).

A la figure V.20.c, on constate que la prise en compte de l'effet des contraintes permet d'obtenir une réduction satisfaisante de la croissance du TiSi_2 sous l'espaceur. Pour cette simulation, le volume d'activation de l'effet retardateur est calibré à: $V_D = 7\text{\AA}^3$. Fornara obtient quant à lui un volume de $V_D = 5\text{\AA}^3$.

A la température de siliciuration (i.e., 730°C), la relaxation des contraintes est très importante [28]. Fornara a extrait un temps de relaxation des contraintes τ d'environ 0.5 seconde à cette température [30]. Appliquée à une modélisation viscoélastique, cela correspond à une viscosité de $\eta = 5 \times 10^{11}$ Poises ($\eta = G \times \tau$). Cette faible viscosité fait que les contraintes du TiSi_2 sont relativement faibles, exception faite de la zone de pincement en bord d'espaceur. Les contraintes générées dans le silicium sont maximales dans cette zone mais ne dépassent pas environ 1.5 GPa en tension, ce qui n'est pas suffisant pour qu'il y ait apparition de boucles de dislocations.

V.4.2 Validation des contraintes

La calibration du modèle à partir de topographies n'est pas suffisante, il est nécessaire de valider quantitativement les contraintes calculées. Pour ce faire, on considère une expérience menée par Steegen mettant en œuvre des mesures locales de contraintes induites par la formation de lignes de TiSi_2 , à partir d'une spectroscopie micro-Raman [28].

Le réseau de lignes de silicures est réalisé par dépôt de 55nm de titane, suivi d'un recuit rapide à 730°C . Le temps de recuit est ajusté de manière à faire croître 65nm ou 110nm de TiSi_2 . Les lignes sont isolées par des structures d'isolation de type LOCOS. Les réseaux sont définis soit par des lignes de $5\mu\text{m}$ de large isolées par des LOCOS de $5\mu\text{m}$ de large, soit par des lignes de $2.5\mu\text{m}$ de large isolées par des LOCOS de $2\mu\text{m}$ de large. La périodicité des structures nous permet de limiter l'étude à une demi-période du réseau dans chaque cas, comme cela est illustré à la figure V.21.

La simulation de cette structure tient compte des différentes sources possibles de contraintes (montées/descentes en température, gravures et croissances de film,...). Comme démontré à l'exemple précédent, les contraintes de croissance du TiSi_2 dans les zones suffisamment éloignées des bords sont modestes. Aux figures V.21 (a, b et c), on constate que les lignes sont en forte tension ($\sim 2\text{GPa}$): ces contraintes proviennent essentiellement des contraintes thermiques générées lors de la descente en température après siliciuration [28].

Pour ces trois motifs, les comparaisons des déviations Raman mesurées avec celles extraites des contraintes simulées sont données aux figures V.21 (a', b' et c'). Le laser ne peut pas traverser un métal réfractaire comme le titane. C'est la raison pour laquelle seuls des points de mesure sous le LOCOS sont disponibles. L'accord entre la simulation et les mesures est tout à fait satisfaisant, sauf au voisinage des bords du film où la simulation surestime nettement les contraintes. Ceci étant, la réflexion partielle du faisceau pour des mesures proches des bords de lignes justifie une certaine précaution quant à la validité de ces mesures [28].

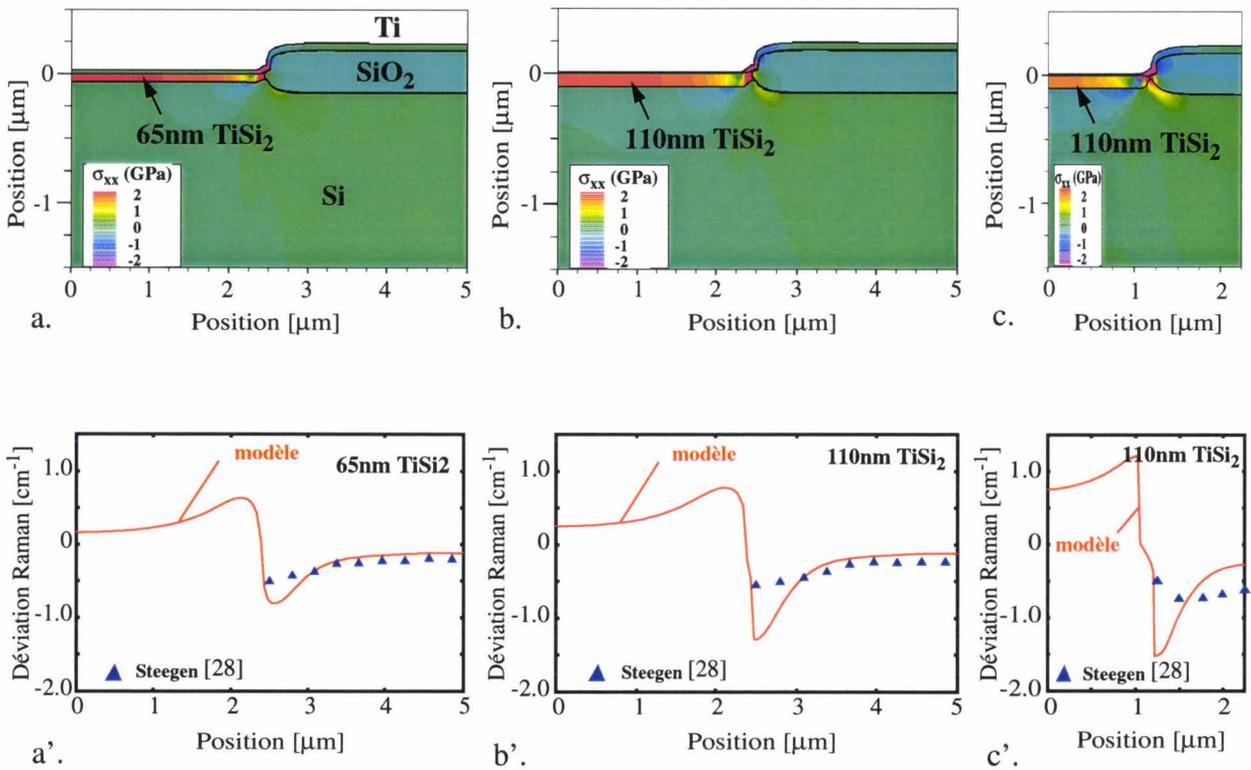


Figure V.21: Champ de contraintes (a, b et c) et profils de déviations Raman (a', b' et c') pour différents réseaux de lignes de TiSi₂.

V.5 Influence des forts dopages

Les niveaux de dopages élevés sont une source à part entière de contraintes mécaniques pour les substrats. Celles-ci sont dues au désaccord de maille induit par la différence des rayons covalents du silicium et des impuretés ioniques. Pour la réalisation des circuits intégrés, ces effets apparaissent essentiellement lors de la réalisation des couches épitaxiales, dans le cas où leurs concentrations en impuretés diffèrent notablement de celle du substrat. De manière à valider le modèle développé pour cette source de contraintes (cf. chapitre IV), nous considérons deux expériences: l'une avec une épitaxie en bore fortement dopée par rapport au substrat [37], et l'autre avec des épitaxies en bore et phosphore faiblement dopées par rapport au substrat [38].

Au paragraphe V.5.2, une application plus particulière du modèle pour l'étude de la déflexion de poutres de silicium est décrite.

V.5.1 Contraintes d'épitaxie

Lin a étudié l'effet du désaccord de maille, induit par épitaxie, sur la courbure des plaques [37]. Il constate que la déflexion des plaques est directement proportionnelle à l'épaisseur de l'épitaxie et à l'amplitude du changement de dopage à l'interface épitaxie/substrat. La

modélisation suppose que les déformations induites dans le système (épitaxie+substrat) ne dépassent pas leur limite élastique (i.e., pas de nucléation de dislocations).

L'étude de Lin repose sur la mesure des déflexions de plaque de 100mm de diamètre et de 675 μm d'épaisseur en fonction de l'épaisseur d'une épitaxie. Le substrat est fortement dopé en bore ($\sim 2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$), contrairement à la couche épitaxiale ($\sim 10^{13} - 10^{14} \text{ cm}^{-3}$).

L'évolution de la déflexion produite par des épitaxies d'épaisseur comprise entre 2 μm et 20 μm est représentée à la figure V.22.a. Les résultats obtenus en appliquant le modèle décrit au chapitre IV y sont également représentés. La géométrie de la structure étant très simple (i.e., épitaxie uniforme sur un substrat plan), il est possible de considérer un domaine de simulation réduit, puis d'extrapoler la déflexion calculée aux dimensions réelles de la structure. Tous les détails concernant la procédure d'extrapolation ainsi que les conditions aux limites à appliquer sont développés en annexe.

Pour les simulations, de manière à réduire les erreurs numériques, on considère un rapport constant de 1/25 entre l'épaisseur de l'épitaxie et l'épaisseur réduite du substrat (t_s'). Le diamètre réduit de simulation est fixé à $D' = 800\mu\text{m}$.

On constate que les résultats donnés par le modèle, après extrapolation, sont en parfait accord avec les mesures faites par Lin, mais également avec la pente théorique. L'expression de la déflexion théorique h_{th} est basée sur la formule de Stoney (équation (A.7)), en combinant l'expression de la déflexion (équation (A.15)) et la loi de Vegard (équation (IV.49)):

$$h_{th} = \left(\frac{3}{4} \cdot \frac{D^2}{t_s^2} \cdot \beta_1 C_{B_0} \right) \cdot t_f \quad (\text{V.10})$$

où D est le diamètre du substrat; t_f et t_s sont les épaisseurs de l'épitaxie et du substrat, respectivement; β_1 représente le coefficient de dilatation du cristal propre au bore, et C_{B_0} est la différence de concentration en bore entre l'épitaxie et le substrat. Cette théorie suppose que les concentrations en dopants sont uniformes. Le bon accord avec l'expérience et le modèle signifie donc que les effets d'inter-diffusion du bore entre le substrat et l'épitaxie sont négligeables. La figure V.22.b représente les profils de déformation et de concentration en bore dans la profondeur de la structure. Ici, on a considéré une épaisseur réduite du substrat de 150 μm . On note en premier lieu que l'inter-diffusion du bore entre le substrat et l'épitaxie est relativement faible, ce qui justifie l'accord des résultats avec la théorie.

L'amplitude de la déformation (biaxiale) théorique à l'interface épitaxie/substrat doit être de $\beta_1 C_{B_0}$ ($\sim 1.0 \times 10^{-4}$). De part l'hypothèse de déformations planes choisie pour cette simulation bidimensionnelle, la déformation calculée est affectée par le coefficient de Poisson du matériau (cf. §IV.3.1.1):

$$\Delta \varepsilon_{epi} = (1 + \nu) \cdot \beta_1 C_{B_0} \sim 1,26 \times 10^{-4} \quad (\text{V.11})$$

Comme l'atteste la figure V.22.b, cette déformation correspond bien à la déformation calculée à l'interface. On note également qu'une part non négligeable de la déformation se retrouve dans le substrat, qui se retrouve en tension près de l'interface avec l'épitaxie et en compression en face arrière. Cet effet est directement lié au rapport entre l'épaisseur du substrat et de l'épitaxie, comme en témoigne la figure V.23.

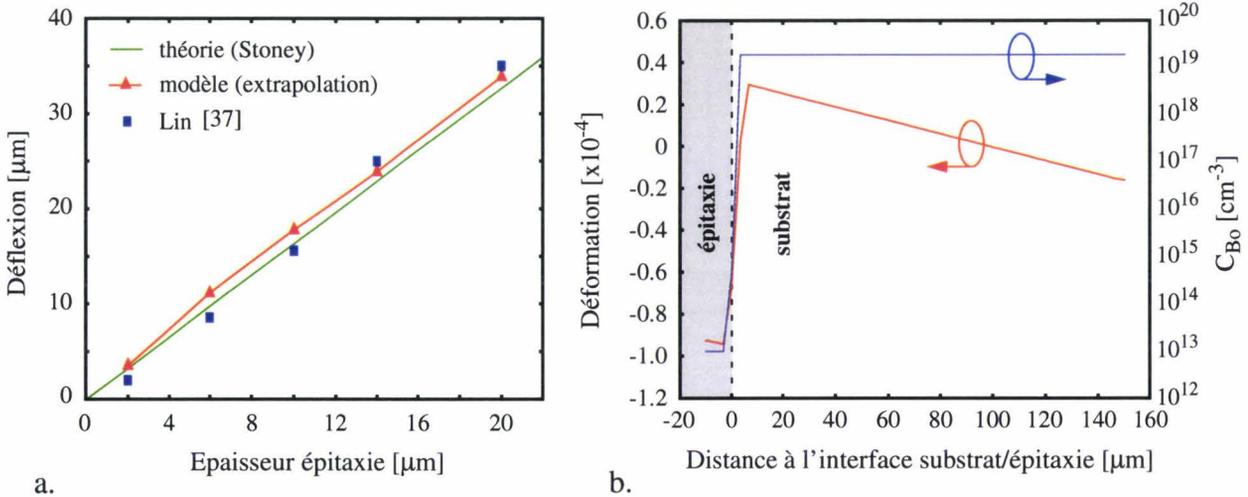


Figure V.22: Déflexion du substrat en fonction de l'épaisseur d'épitaxie (expériences de Lin [37]) (a); Déformation et concentration en bore de la structure avec un domaine de simulation réduit ($t'_s = 150\mu\text{m}$) pour une épitaxie de $10\mu\text{m}$.

Quelle que soit l'épaisseur réduite t'_s du substrat utilisée pour la simulation, la variation d'amplitude de la déformation à l'interface reste égale à la valeur théorique $\Delta\epsilon_{\text{epi}}$. Si l'épitaxie était infiniment mince par rapport au substrat, celui-ci ne se déformerait pas et toute la déformation serait supportée par l'épitaxie. Dans le cas contraire, on aboutit à une répartition plus ou moins importante de la déformation en fonction du rapport des épaisseurs.

On peut noter également à la figure V.23 que, comme le prévoit la théorie de l'élasticité, l'axe neutre se situe à environ 1/3 de l'épaisseur du substrat (cf. annexe).

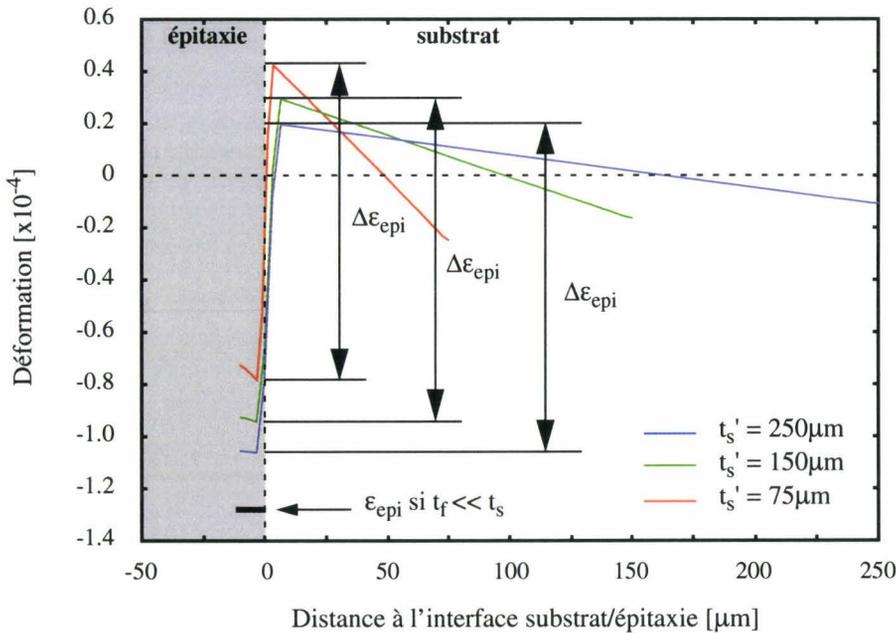


Figure V.23: Profils de déformation de la structure pour un épitaxie de $10\mu\text{m}$ en fonction de l'épaisseur du substrat considérée.

La deuxième expérience considérée porte sur la variation des concentrations relatives entre le substrat et l'épitaxie à épaisseur constante. Herzog a mesuré, à la fois par déflexion de

plaque et par rayon X, les déformations engendrées dans des épitaxies dopées en bore ou en germanium [38]. Le substrat est quant à lui faiblement dopé en bore ($\sim 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$).

Les mesures de Herzog ainsi que les résultats obtenus avec le modèle sont représentés à la figure V.24, pour des épitaxies dopées en bore et en germanium. On peut noter dans le cas d'une épitaxie en bore (figure V.24.a) qu'en deçà d'une certaine concentration, la déformation reste élastique et le modèle est en excellent accord avec les mesures. Pour les fortes concentrations, des relaxations plastiques par génération de dislocations sont observées, ce qui fait chuter la déformation (élastique) mesurée.

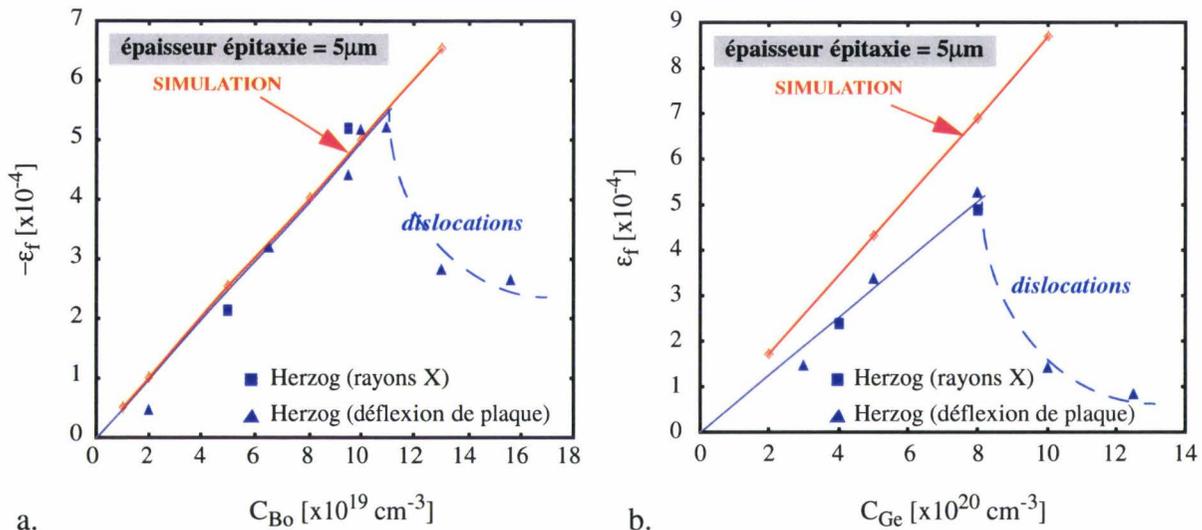


Figure V.24: Déformation dans le film d'épitaxie en fonction de son dopage en bore (a), et en germanium (b).

On observe une variation tout à fait similaire dans le cas d'un dopage au germanium (figure V.24.b), mais la déformation est à présent positive (dilatation de la maille du cristal). Néanmoins, le modèle surestime la déformation élastique dans ce cas. Cet écart ne peut pas être imputé au choix du modèle de déformation (linéaire ou volumique), étant donné que le coefficient d'expansion β du germanium est équivalent pour ces deux modèles (cf. tableau IV.2). Une caractérisation complémentaire a révélé que, même à des concentrations proches de 10^{21} at./cm^3 , les atomes de germanium sont en sites substitutionnels et, de ce fait, contribuent à l'expansion de la maille du cristal de silicium [38]. La seule différence notable avec le cas du bore est que les dopages en germanium doivent être près d'un ordre de grandeur supérieur pour atteindre les mêmes niveaux de déformations. Une théorie reposant sur la loi de Vegard (au premier ordre) semble insuffisante à ces niveaux de concentrations. Des expériences complémentaires sont souhaitables pour confirmer ou non cette observation.

V.5.2 Déflexion de poutres de silicium

La réalisation de poutres intégrées sur silicium est une technique très populaire pour fabriquer des micro-capteurs et actionneurs. Les capteurs silicium sont généralement composés de fines membranes, ponts, cantilevers et poutres. Une attaque chimique "humide" est souvent employée pour les réaliser [39].

Des marqueurs d'arrêt en bore constitue une technique très pratique pour contrôler la profondeur de gravure dans les substrats de silicium. Les films de silicium peuvent ainsi être fabriqués par diffusion thermique ou implantation de bore sur une surface du substrat, suivi d'une gravure à partir d'une ouverture de masque par l'autre face du substrat. Pour des gravures chimiques humides à partir de KOH, la vitesse d'attaque décroît de manière significative lorsque la concentration en bore excède une valeur limite ($\sim 6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$). Les fortes liaisons Si-B sont supposées favoriser la compacité du cristal, requérant ainsi une plus grande énergie pour expulser les atomes de silicium [40]. A ces niveaux de concentrations, les contraintes résiduelles de ces micro-structures (ex: poutres) peuvent être suffisamment importantes pour détériorer leurs performances et/ou être à l'origine de défaillances mécaniques.

Nous considérons les expériences réalisées par Chu pour illustrer l'application des modèles de calcul des contraintes déjà présentés, et plus particulièrement l'effet des dopages élevés sur les contraintes résiduelles de poutres de silicium [41]. Les principales étapes de fabrication de ces poutres sont les suivantes: des substrats (100) sont oxydés et les fenêtres définissant ces poutres sont révélées par photolithographie. Puis des prédépôts en bore à partir d'une source solide (BSG) à 1125°C pendant 1h ou 2h sont réalisés. Une oxydation humide de 15min. à 950°C est alors effectuée pour faciliter la gravure du BSG. Toutes les plaques ont subi jusqu'à présent les mêmes étapes et sont qualifiées de "diffusées". A partir de là, une oxydation sèche à 1100°C pendant 50min. est menée sur certaines plaques, après gravure du film de BSG. Ces plaques sont qualifiées "d'oxydées".

Cette procédure expérimentale définit donc quatre variantes dont les profils simulés de dopage en bore sont représentés à la figure V.25.a. L'intersection avec la concentration limite d'attaque fixée à $6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ permet de prédire l'épaisseur finale des poutres. On constate que cette épaisseur varie peu, que l'étape d'oxydation sèche soit réalisée ou non: les poutres ayant subi un prédépôt de bore d'une heure ou de deux heures ont une épaisseur proche de $w_1 \sim 1.6 \mu\text{m}$ ou $w_2 \sim 2.3 \mu\text{m}$, respectivement. Ces valeurs correspondent aux épaisseurs effectivement mesurées par Chu [41].

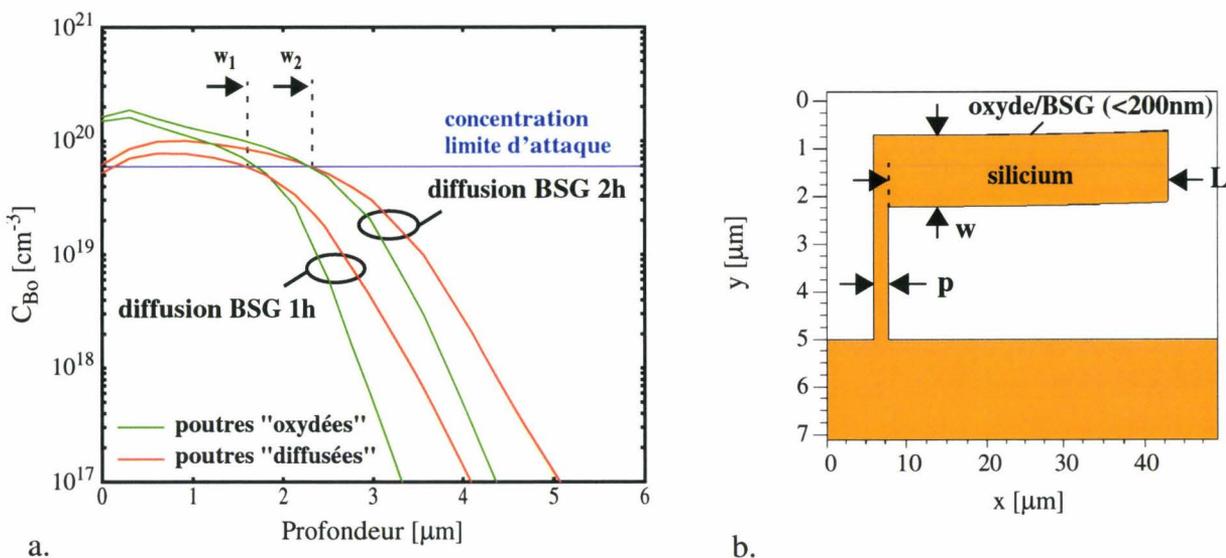


Figure V.25: Profils de dopage en bore pour les différents procédés de fabrication des poutres (a); géométrie typique d'une poutre simulée (b).

Une géométrie typique considérée pour la simulation est reproduite à la figure V.25.b. Les principales caractéristiques sont la longueur de la poutre (L) et son épaisseur (w). Ces poutres sont théoriquement fixées latéralement mais pour permettre leur étude en 2D, nous considérons une fixation par un pied de largeur p. Une étude équivalente a démontré que cette hypothèse n'affecte pas les résultats [42] et nous avons vérifié que la largeur du pied n'affecte pas non plus la déflexion de la poutre.

Dans la pratique, les poutres font 2mm de long et 100µm de large. Une si grande largeur justifie l'application de l'hypothèse des déformations planes pour nos simulations 2D. De manière à réduire la taille du domaine de simulation, nous exploitons le fait que la courbure de la poutre est indépendante de sa longueur. Chu l'a vérifié expérimentalement et nous faisons de même pour valider le calcul mécanique du simulateur: la figure V.26 représente les résultats de déflexions de poutres de différentes longueurs ayant subi le même procédé de fabrication.

Pour les longueurs L' considérées, le rayon de courbure R de la poutre reste très grand par rapport à sa longueur (L'/R ≪ 1), de sorte que l'on peut appliquer l'équation (A.15) (cf. Annexe), une fois la déflexion h' connue:

$$R = \frac{(L')^2}{2h'} \tag{V.12}$$

Pour l'extrapolation des résultats aux dimensions réelles des poutres (i.e., L = 2mm), l'hypothèse précédente n'est plus justifiée et il faut considérer l'équation (A.14), qui, combinée avec l'équation (V.12), donne:

$$h = \left(\frac{(L')^2}{2h'}\right) \left[1 - \cos\left(\frac{2Lh'}{(L')^2}\right)\right] \tag{V.13}$$

Aux vues des résultats obtenus au tableau V.4, la courbure n'est pas affectée si la longueur L' considérée reste suffisamment grande devant les autres dimensions (p,w). Pour le reste de l'étude, on considère que L' = 35µm.

Tableau V.4: Déflexions calculées (h') et extrapolées (h) pour différentes longueurs de poutres (L').

L' [µm]	h' [µm]	h [µm]
8.35	+9.96e-3	556
21.3	+5.42e-2	468
27.9	+8.94e-2	451
35.0	+1.42e-1	456

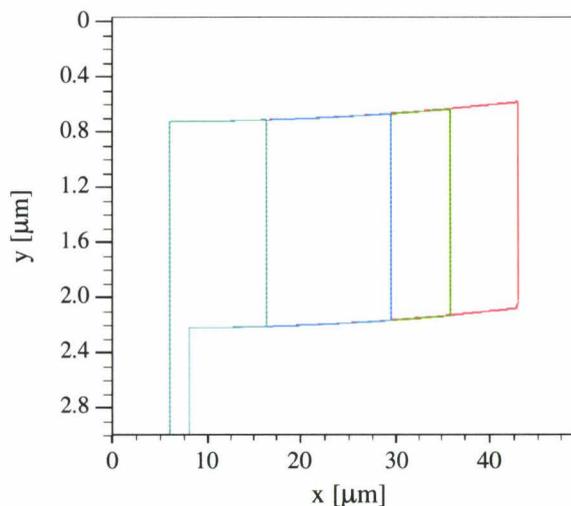


Figure V.26: Influence de la longueur des poutres sur la courbure et la déflexion.

Nous analysons à présent les sources de contraintes à l'origine de la déflexion des poutres. Pour cela, nous considérons les poutres réalisées à partir d'un prédépôt de bore (BSG) d'une heure suivie d'une oxydation humide à 950°C. L'épaisseur totale du bicouche (oxyde/BSG) mesurée est de 200nm [41]. La superposition de la contrainte thermique compressive générée par la descente en température après la formation des deux films, et de la contrainte compressive intrinsèque lors de la croissance de l'oxyde, a pour effet de courber les poutres vers le substrat ($h < 0$). L'amplitude de cette déflexion est directement proportionnelle à la force exercée par le bicouche, donc à son épaisseur, comme en témoigne la figure V.27.a.

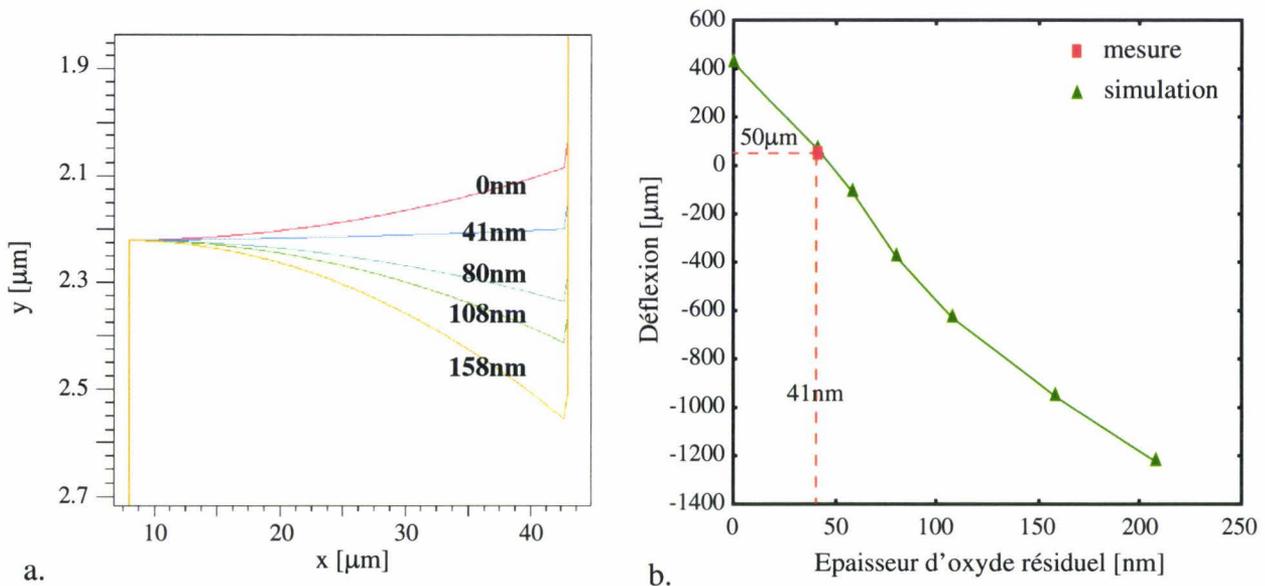


Figure V.27: Déflexions des poutres en fonction de l'épaisseur d'oxyde résiduel.

On constate en outre que si le bicouche est complètement gravé, la poutre a une déflexion positive: ceci est lié au gradient de dopage en bore à travers l'épaisseur de la poutre. En effet, comme en témoigne les profils de dopage de la figure V.25.a, le maximum de la concentration en bore pour les poutres "diffusées" est proche de leur surface supérieure. Les poutres se courbent donc de ce côté pour relaxer les déformations en tension qui y sont induites.

Lors de l'étape de libération des poutres, une partie du bicouche en surface est gravée. Toujours pour le même procédé, Chu a mesuré une épaisseur d'oxyde résiduel de 41nm à laquelle correspond une déflexion de +50 μm . La simulation prédit cette déflexion si l'épaisseur d'oxyde résiduel est de 41nm.

Les déflexions mesurées et simulées pour les quatre variantes du procédé de fabrication précédemment décrites sont reportées au tableau V.5. Pour chacune, une mesure supplémentaire après gravure complète du masque d'oxyde est également effectuée. On remarque que la simulation est en bon accord avec l'expérience pour les poutres "diffusées", qualitativement et quantitativement.

Pour les poutres "oxydées", on note que le modèle surestime le "redressement" des poutres après la suppression du masque. Plusieurs explications peuvent être formulées: soit la diffusion du bore et donc le déplacement du maximum de concentration durant l'oxydation sont

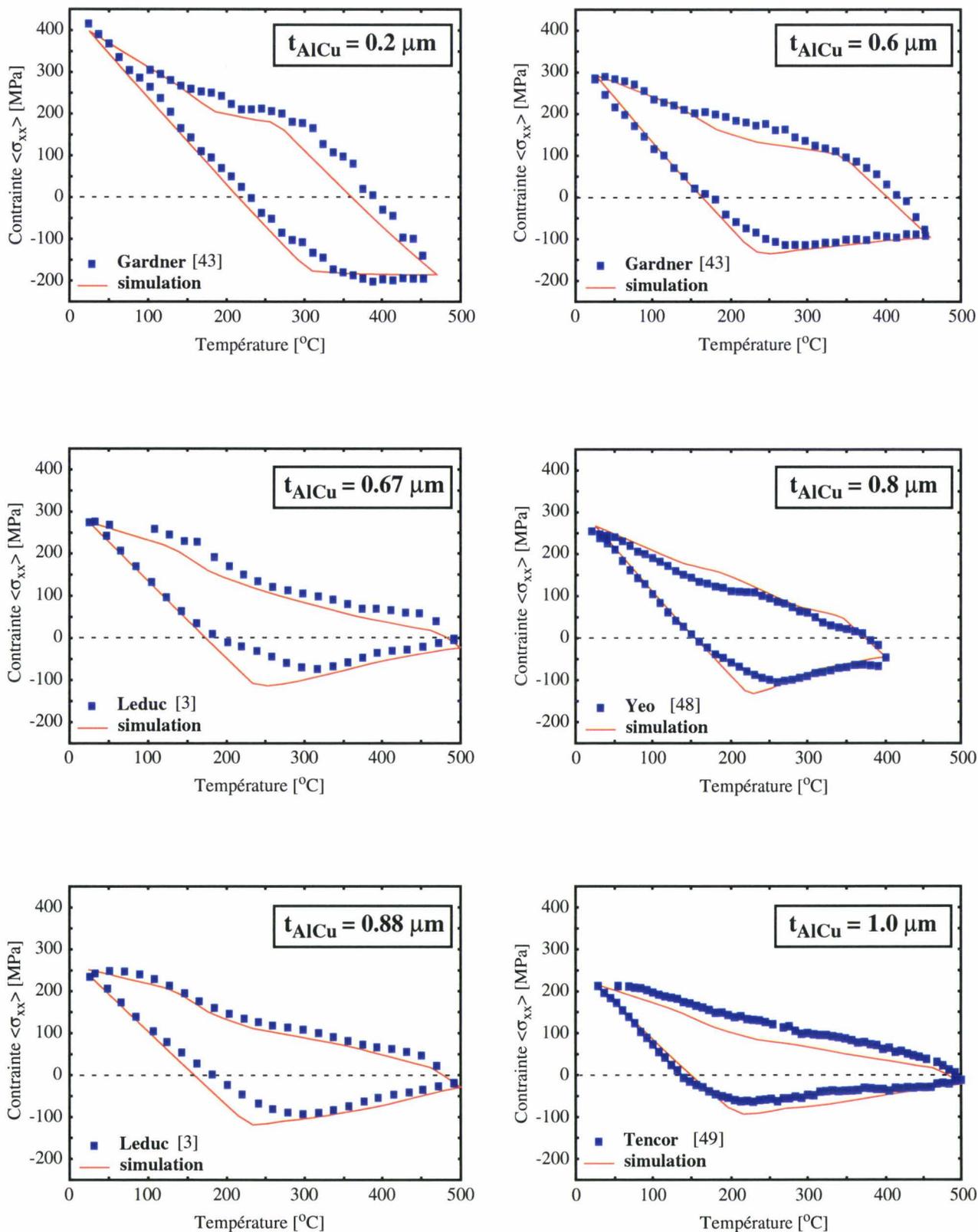


Figure V.28: Calibration du comportement élastoplastique des alliages d'aluminium-cuivre en fonction de l'épaisseur (symboles: mesures; ligne: modèle).

A la figure V.29.a, la calibration de la limite d'élasticité est comparée à d'autres travaux, pour un film de $1\mu\text{m}$ d'épaisseur. Les valeurs calibrées sont en bon accord avec le modèle linéaire défini par Shen [46] ou les mesures de Lee [47]. Dans tous les cas, on peut noter que la limite d'élasticité est proche de zéro au-delà de 400°C , ce qui indique qu'à cette température et pour cette épaisseur, les contraintes de l'alliage sont presque entièrement relaxées par écoulement plastique. La calibration en température de la limite d'élasticité σ_Y est effectuée en seulement sept points ($25, 150, 200, 300, 375$ et 475°C).

Les valeurs calibrées de la limite d'élasticité σ_Y en fonction de l'épaisseur et de la température sont représentées par les isocontours de la figure V.29.b. On retrouve les caractéristiques déjà soulignées, à savoir que la limite d'élasticité diminue avec l'épaisseur du film et avec la température. D'après la forme des isocontours, on peut également constater que la limite d'élasticité en tension (i.e., à basse température) est moins sensible à l'épaisseur du film que la limite d'élasticité en compression (i.e., à haute température).

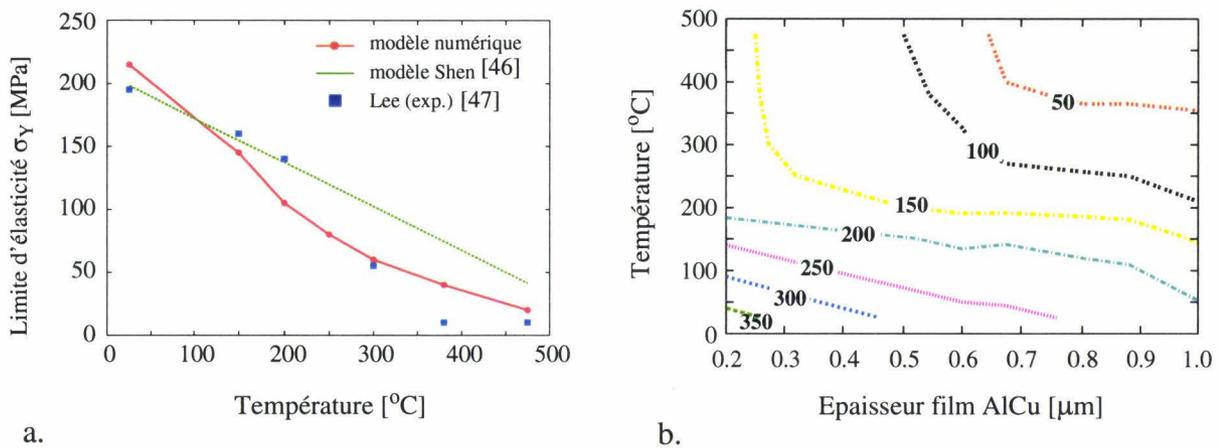


Figure V.29: Calibration de l'élastoplasticité; comparaison des limites d'élasticité pour un alliage de $1.0\mu\text{m}$ d'épaisseur (a); limite d'élasticité en fonction de la température et de l'épaisseur(b).

De manière à valider la calibration du modèle, on considère une expérience relativement simple menée par Yeo [48]. Un film d' $\text{AlCu}_{(1\%)}$ de $0.8\mu\text{m}$ d'épaisseur est déposé sur un substrat de silicium (100) pré-oxydé à une épaisseur de $0.45\mu\text{m}$. Des réseaux périodiques sont définis en différentes portions de la plaque en réalisant des lignes d' AlCu de 2.5 mm de long et de largeur $0.5, 1.0, 2.0,$ et $4.0\mu\text{m}$, respectivement. L'espacement entre les lignes est identique à leur largeur. La plaque est ensuite découpée pour isoler chaque réseau et mesurer les contraintes des lignes par une technique de mesure de déflexion de plaque. Il est possible d'extraire une valeur moyenne de la contrainte de la ligne (composante perpendiculaire à la ligne) en effectuant des mesures de courbure pour plusieurs orientations [48]. Les variations en température de cette contrainte moyenne, pour les réseaux et pour le film uniforme, sont représentées à la figure V.30.

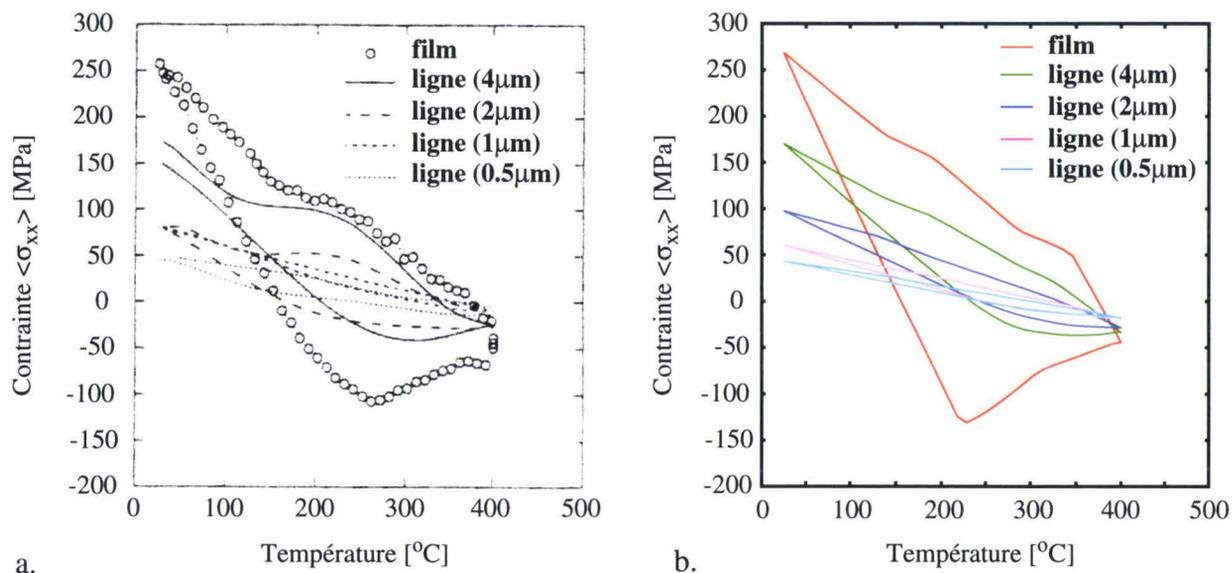


Figure V.30: Variations en température des contraintes de lignes d'AlCu pour différentes largeurs; mesures [48] (a), résultats du modèle calibré (b).

On constate que l'amplitude des cycles d'hystérésis est de moins en moins marquée lorsque les lignes deviennent plus étroites. Cet effet est essentiellement lié à la relaxation de la contrainte par gravure: plus le film est étroit, plus ses contraintes relaxées aux bords des lignes ont un poids important dans la valeur moyenne. Sans aucun ajustement de la valeur calibrée de la limite d'élasticité, le modèle numérique rend parfaitement compte de ce comportement.

A partir de ce modèle calibré, il est possible de mener des études plus spécifiques sur les contraintes générées dans les édifices d'interconnexions. Pour ce faire, nous nous intéressons à un problème qui a fait l'objet d'un certain nombre d'études: l'optimisation de la géométrie des lignes d'AlCu en terme de contraintes mécaniques [50,51,52]. Nous nous basons plus particulièrement sur l'étude menée par Yeo pour la définition du motif [50]. Celui-ci est réalisé de manière similaire au réseau de lignes précédemment étudié, à ceci près que le réseau est à présent passivé par un oxyde PECVD-TEOS, comme cela est illustré à la figure V.31.a (dépôt d'un film épais d'oxyde TEOS suivi d'une planarisation par CMP). La symétrie du réseau permet de restreindre l'étude à ce seul motif élémentaire.

Le confinement produit par l'encapsulation des lignes d'AlCu s'accompagne d'une modification importante de l'état de contraintes global. En effet, les lignes ne possèdent plus de surfaces libres après leur passivation. Les expansions/contractions lors des montées/descentes en température ne pouvant plus s'effectuer librement, l'amplitude des variations de contrainte en température augmentent de façon significative si la ligne est passivée.

La seconde conséquence qui résulte de la passivation est la diminution des phénomènes plastiques des lignes d'AlCu. Ainsi, les contraintes passe d'une configuration biaxiale (ligne non-passivée) à une configuration triaxiale (ligne passivée). On aboutit alors à un état de contraintes quasi-hydrostatique, situation pour laquelle le matériau tend vers un comportement élastique [53]. Cette caractéristique rhéologique est prise en compte dans le modèle de part la décomposition de la loi constitutive en une partie de dilatation purement élastique et une partie de déviation élastoplastique.

Comme en témoignent les résultats présentés à la figure V.31.b, le modèle rend compte des deux phénomènes qui viennent d'être évoqués. Pour une ligne de $0.8\mu\text{m}$ d'épaisseur et $0.8\mu\text{m}$ de large, la passivation augmente considérablement l'amplitude des variations en contraintes en température. Plus la géométrie de la ligne présente un rapport d'aspect ($t_{\text{AlCu}}/w_{\text{AlCu}}$) proche de l'unité, plus les phénomènes plastiques s'atténuent (i.e., disparition de l'hystérésis).

Nous examinons à présent plus quantitativement l'influence de la configuration géométrique de la ligne sur ses contraintes résiduelles.

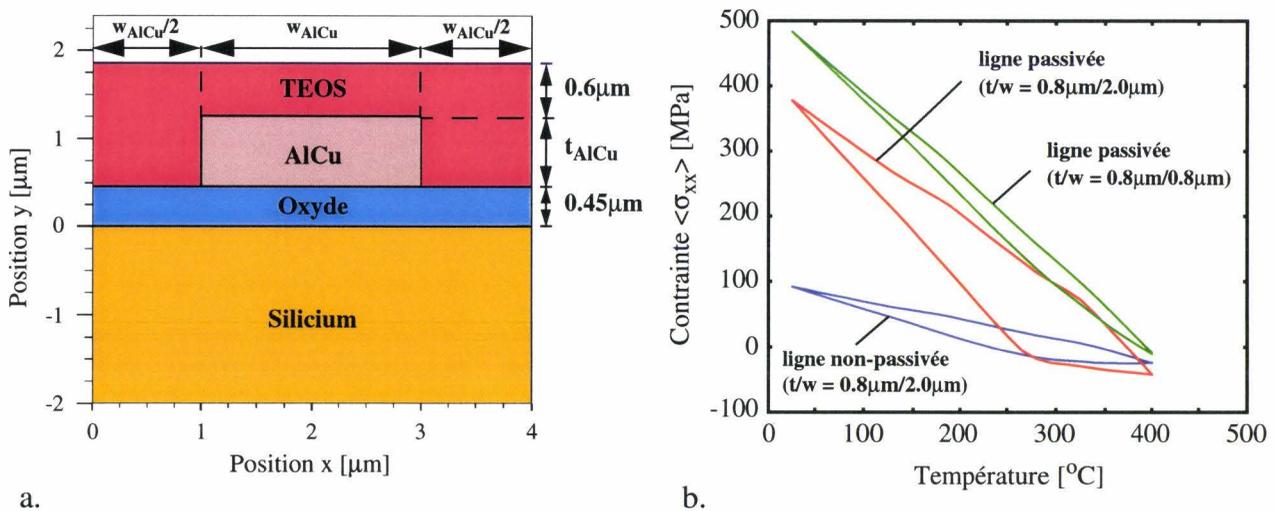


Figure V.31: Définition du motif élémentaire du réseau de lignes passivées [50] (a); influence de la passivation sur les contraintes des lignes d'AlCu (b).

La contrainte latérale moyenne (i.e., composante perpendiculaire aux lignes) est évaluée après réalisation du motif, pour trois épaisseurs de lignes t_{AlCu} ($0.8\mu\text{m}$, $0.6\mu\text{m}$ et $0.2\mu\text{m}$), et en modulant le rapport d'aspect de la ligne ρ ($t_{\text{AlCu}}/w_{\text{AlCu}}$) (figure V.32.a). Lorsque ce rapport d'aspect tend vers zéro, on se rapproche de la configuration d'un film uniforme et l'on retrouve la contrainte qui avait servi à la calibration (cf. figure V.28). Pour un rapport d'aspect grand ($\rho > 2.5$), les lignes deviennent très étroites et leurs contraintes sont essentiellement gouvernées par la continuité à respecter avec la couche de passivation (autrement dit, les contraintes de surface deviennent prépondérantes par rapport aux contraintes de volume). L'effet de l'épaisseur de la ligne s'estompe alors et les contraintes tendent vers une même valeur. Entre ces deux cas extrêmes, il existe une configuration géométrique pour laquelle la contrainte est maximale. On peut constater que ce maximum se produit à un rapport d'aspect d'autant plus petit que la ligne a une limite d'élasticité élevée (i.e., $\rho \rightarrow 0$ pour une ligne élastique). L'amplitude augmente également avec la "rigidité" de la ligne.

Il semble donc que ce serait moins la géométrie même du réseau de lignes qui soit à l'origine de ces tendances que l'amplitude du caractère plastique de ces lignes.

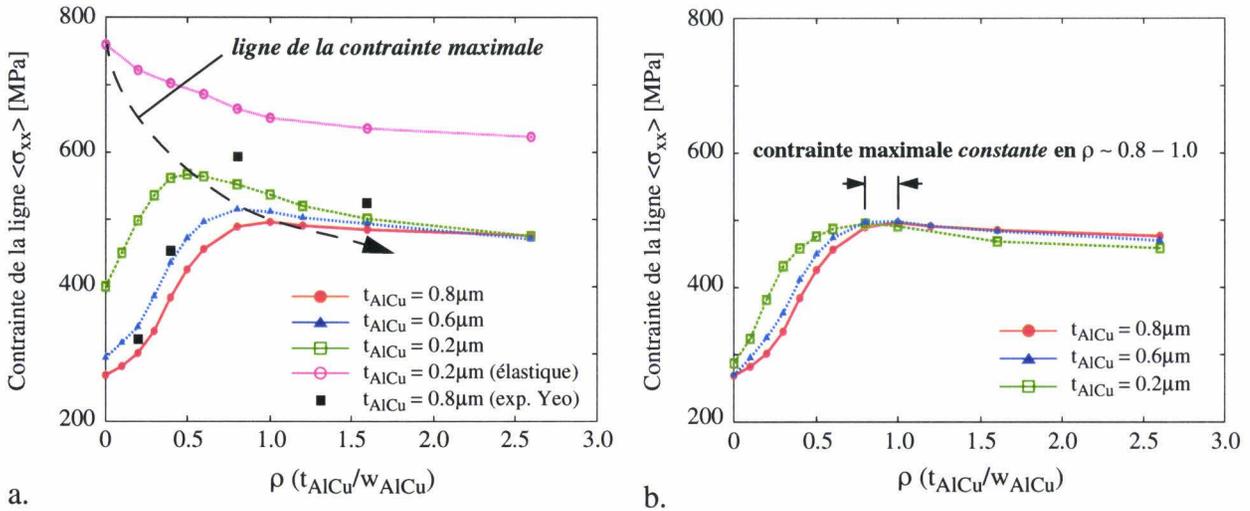


Figure V.32: Evolution des contraintes des lignes d'AlCu passivées en fonction de leur rapport d'aspect en considérant la dépendance en épaisseur de la limite d'élasticité σ_Y (a), et en ne la considérant pas (b).

Pour valider cette hypothèse, la même étude est menée mais en considérant cette fois que la limite d'élasticité est indépendante de l'épaisseur de la ligne (figure V.32.b). La limite commune choisie est celle d'un film de $0.8\mu m$ d'épaisseur. Quel que soit l'épaisseur, les contraintes des lignes atteignent leur maximum pour un rapport d'aspect proche de l'unité et avec une même amplitude. C'est donc bien la limite d'élasticité qui détermine la configuration géométrique critique qui maximise les contraintes.

Cette constatation permet de nuancer les conclusions de Yeo pour qui le maximum de contrainte est toujours proche d'un rapport d'aspect unitaire, indépendamment de l'épaisseur du film [50]. Néanmoins, ses mesures n'ont été réalisés que dans le cas de lignes de $0.8\mu m$ d'épaisseur. Ces mesures, représentées à la figure V.32.a, sont en bon accord avec la prédiction faite par le modèle. Par une étude de type éléments finis, Shen constate l'influence de l'épaisseur sur le maximum de contraintes, mais il ne l'attribue uniquement qu'à l'effet du confinement de la couche de passivation [52]. En décorrélant l'effet de la limite d'élasticité de l'effet purement géométrique, nous avons pu démontrer que c'est la conjonction des deux phénomènes (confinement des lignes par la couche de passivation et variation de la limite d'élasticité en épaisseur) qui détermine l'amplitude du maximum de contraintes, ainsi que la configuration géométrique correspondante.

Bien qu'encore peu utilisé pour les technologies actuelles, le cuivre constitue une alternative très intéressante pour remplacer les interconnexions en alliages d'aluminium. Deux raisons majeures à ce changement annoncé: d'une part, le cuivre possède une résistance à l'électromigration bien supérieure à l'aluminium; d'autre part, la faible résistivité du cuivre par rapport à celle de l'aluminium permet théoriquement une réduction d'environ 30% du délai d'interconnexion RC [54].

Cependant, les contraintes des films de cuivre présentent des réponses en température tout à fait similaire à celles des alliages d'aluminium, comme en témoigne la figure V.33. On constate que le modèle peut être étendu à ce type de matériau sans aucune difficulté.

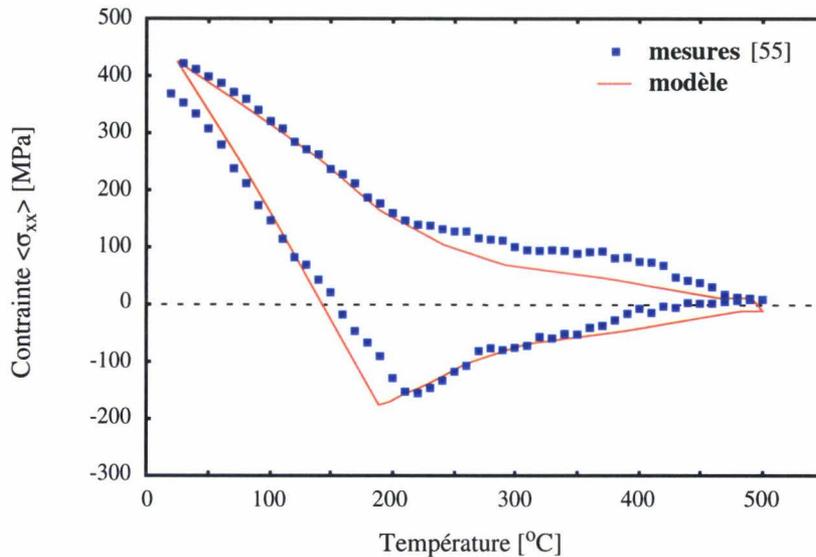


Figure V.33: Variations en température de la contrainte d'un film de cuivre.

V.6.2 Comportements plastiques du silicium

Pour la production des semiconducteurs, la formation de défauts cristallins induits par des niveaux trop élevés de contraintes dans les substrats de silicium est un problème majeur. Plus particulièrement, la génération de dislocations est reconnue comme la principale difficulté à surmonter pour la mise au point des structures d'isolation [56].

Physiquement, la génération de dislocations est un phénomène de plasticité: au delà d'une certaine limite de déformation, le silicium n'arrive plus à se déformer élastiquement en réponse à de nouvelles sollicitations. Il y a alors rupture locale de la structure cristalline du silicium afin de "relaxer" ces déformations excessives. La principale étape de fabrication susceptible d'engendrer suffisamment de contraintes pour déclencher l'apparition de dislocations est la réalisation des isolations entre composants, que ce soit pour des structures LOCOS [57,58] ou STI [59]. De même, dans un échantillon contenant déjà des dislocations, l'apport de nouvelles déformations plastiques se traduira par une propagation de ces boucles de dislocation et par leur multiplication [60].

Nous allons à présent examiner en quoi le modèle d'élastoplasticité précédemment défini peut être appliqué au silicium pour corrélérer, qualitativement et quantitativement, l'apparition de dislocations avec les niveaux de contraintes calculés.

Pour ce faire, nous considérons l'expérience menée par Vanhellefont [57]: une isolation LOCOS est réalisée sur un substrat orienté (001) par une longue oxydation de 10h à 975°C en ambiance humide. Le masque est formé uniquement à partir d'un film de nitrure de 120nm d'épaisseur, sans piédestal d'oxyde: le pincement du LOCOS, et donc les contraintes induites dans le silicium, sont maximales pour ce type de structure. La figure V.34 représente les résultats obtenus lors de sa formation. Les champs de contraintes représentés correspondent à la contrainte de Von-Mises. Cette contrainte, définie au §II.2.2.2, est la valeur qui est comparée à la limite d'élasticité du matériau pour définir la transition de comportement élastique/plastique (tout comme pour l'aluminium, on peut définir une limite d'élasticité en contraintes

pour le silicium [61]). La simulation de cette isolation a été menée en considérant le silicium comme purement élastique (figure V.34.a) et en activant le modèle d'élastoplasticité en choisissant une valeur arbitraire de la limite d'élasticité du silicium: $\sigma_Y = 1 \text{ GPa}$ (figure V.34.b). Cette valeur de la limite d'élasticité, volontairement choisie très élevée, définit le niveau de contraintes au-delà duquel des dislocations d'environ 10nm de rayon peuvent être nucléées. On remarque que les contraintes de Von-Mises sont maximales dans le silicium dans la région du bec d'oiseau et qu'elles activent le comportement plastique dans cette région. Ce déclenchement bien localisé de la plasticité est confirmé de manière indirecte par la présence d'une dislocation (boucle de Hu [57]), observée par Vanhellemont (figure V.34.c).

D'un point de vue numérique, il est à noter que le traitement découplé du problème présenté au §IV.2.2.3 (i.e., traitement viscoélastique non-linéaire de la croissance de l'oxyde, puis traitement du comportement élastoplastique du silicium) ne pénalise que très modérément le temps de calcul: le temps CPU¹ passe de 3550 secondes (figure V.34.a) à 3764 secondes (figure V.34.b) lorsque l'élastoplasticité du silicium est activée, soit une pénalisation d'environ 6% seulement.

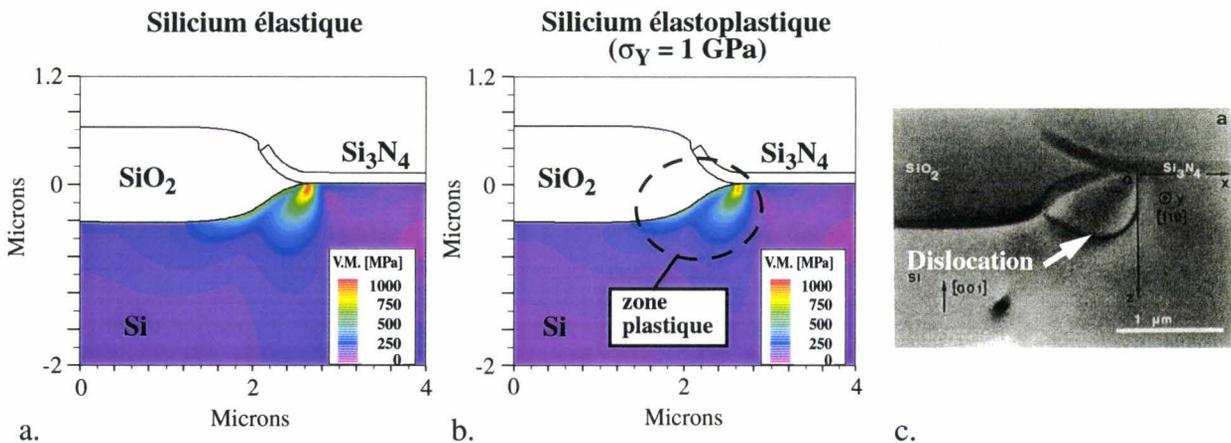


Figure V.34: Croissance d'une isolation LOCOS en considérant un substrat élastique (a), ou élastoplastique (b); photographie de la structure [57] (c).

Tentons de valider maintenant de manière plus quantitative les niveaux de contraintes calculés en s'appuyant sur la localisation des dislocations dans le substrat. Pour cela, nous exploitons le fait que les dislocations généralement induites dans le silicium ont une configuration cristallographique bien particulière: elles se trouvent dans les plans de glissement de type (111) et ont un vecteur de Burger de type $(a/2)[110]$ (où a est le paramètre de maille du cristal). On les appelle le plus souvent "dislocations 60°".

Lorsque des dislocations 60° apparaissent dans un plan de glissement donné, l'équilibre entre les champs de contraintes existants dans le substrat et les forces qu'exercent les dislocations entre elles est à l'origine de leur "répartition" ordonnée dans ce plan [57,58]. Suivant un procédé de réalisation d'isolation LOCOS très semblable à celui déjà présenté (oxydation H_2O à 975°C pendant 2h), Vanhellemont a observé la répartition de dislocations 60° représentée à la figure V.35.a. On constate clairement que toutes les dislocations appartiennent au même plan de glissement (111) qui atteint le bord du LOCOS formé. Notons par ailleurs que

1. SUN Ultra 4 - 400 MHz

ces dislocations se referment nécessairement à la surface du silicium et confèrent à ces dislocations la géométrie de demi-boucle [60].

Pour quantifier cette répartition, on évalue le champ des contraintes de cisaillement résolu RSS (*Resolved Shear Stress*) qui s'obtient à partir du tenseur des contraintes $\{\sigma\}$, du vecteur de Burger \mathbf{b} des dislocations et de la normale \mathbf{n} au plan de glissement de ces dislocations [60]:

$$\text{RSS} = \sum_{i,j=1}^3 \frac{b_i \cdot \sigma_{ij} \cdot n_j}{|\mathbf{b}|} \quad (\text{V.14})$$

Pour le motif étudié, la configuration cristallographique des dislocations observées correspond à un plan de glissement (111) avec un vecteur de Burger $(a/2)[10\bar{1}]$. Le champ de contraintes RSS répondant à ces caractéristiques est représenté à la V.35.b.

La contrainte RSS est directement proportionnelle à la force qui s'exerce sur la ligne de dislocation et son amplitude permet donc de définir si le rayon de la dislocation tend à croître, à décroître ou à se stabiliser. Pour qu'il y ait glissement de la dislocation, le RSS doit être supérieur à une certaine force nécessaire à initier ce mouvement: la force Peierls [62]. Cette force peut dépendre d'un certain nombre de paramètres comme la température, le dopage,...

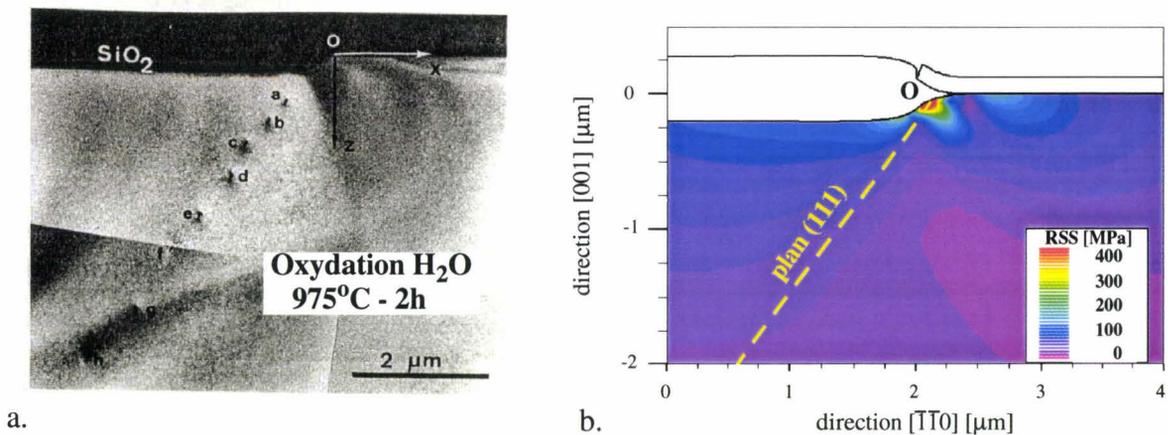


Figure V.35: Isolation LOCOS mettant en évidence l'apparition de dislocations (a); champ de contrainte RSS correspondante, calculée pour le plan de glissement (111), et en considérant un vecteur de Burger de $(a/2)[10\bar{1}]$ (b).

Leroy a établi un abaque permettant de déterminer les différents régimes dynamiques (croissance, décroissance ou stabilité) en fonction du rayon de la boucle de dislocation considérée et de la contrainte RSS où se trouve la dislocation (figure V.36.a) [61]. Cet abaque est également paramétré en fonction de la force de Peierls. Les boucles de petites dimensions s'annihilent sauf si le champ de contrainte RSS est très important ($\geq 1\text{GPa}$), tandis que la stabilité sera facilitée pour des grandes rayons de boucle.

Une coupe correspondant au plan d'observation des dislocations est effectué à partir du champ de contrainte RSS et l'évolution de cette contrainte à partir de la surface du silicium est représentée à la figure V.36.b. Le résultat est reporté en échelle logarithmique pour faciliter la comparaison avec l'abaque de Leroy.

En confrontant la contrainte RSS simulée avec l'abaque, on constate qu'on entre en régime de stabilité pour des rayons de dislocations supérieurs à environ 200-300nm. En deçà, aucune dislocation ne devrait être observée. Ce résultat est en bon accord avec la position des dislocations de la figure V.35.a puisque la 1^{ère} dislocation n'apparaît qu'à environ 400nm de la surface du silicium (rayon mesuré selon le plan (111)). Les autres dislocations ont des rayons plus grands et se répartissent en fonction de leurs interactions (effet non pris en compte dans notre modélisation).

A travers cet exemple mettant en œuvre des phénomènes élastoplastiques, on valide indirectement le calcul des contraintes dans le substrat.

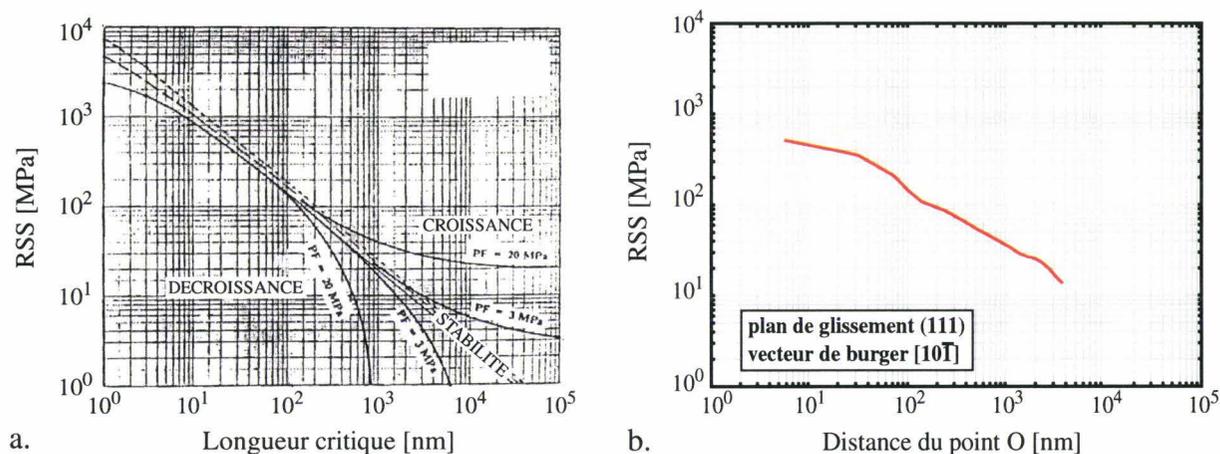


Figure V.36: Abaque de Leroy [60] (a); profil de la contrainte RSS à température ambiante et le long du plan (111) (b).

Références Bibliographiques du Chapitre V

- [1] R.M. LEVIN, *Water Absorption and Densification of Phosphosilicate Glass Films*, J. Electrochem. Soc., **129**(8), p. 1765, 1982.
- [2] M. NOYORI et Y. NAKATA, *Interaction Between Water and Scaled CMOS FET's with Phosphosilicate Glass Passivation Films*, J. Electrochem. Soc., **131**, p. 1109, 1984.
- [3] P. LEDUC, *Etudes des Contraintes Mécaniques dans les Edifices d'Interconnexions d'un Procédé Submicronique*, Thèse de doctorat, USTL, 1999.
- [4] T. HOFFMANN, P. LEDUC et V. SENEZ, *Finite-Element Calculations of Mechanical Stresses Induced by Water Adsorption/Desorption in Silicate Glasses*, J. Vac. Sci. Technol. B, **17**(5), pp. 2603-2609, 1999.
- [5] E.J. MCINERNEY et P.A. FLINN, *Diffusivity of Moisture in Thin Films*, IEEE Proc. IRPS, p. 254, 1982.
- [6] M. YOSHIMARU et H. MATSUHASI, J. Electrochem. Soc., **143**, p. 3032, 1996.
- [7] N. NAGASIMA, H. SUZUKI, K. TANAKA et S. NISHIDA, J. Electrochem. Soc., **121**, p. 434, 1974.
- [8] B. BUSHAN et S.P. MURARKA, J. Vac. Sci. Technol. B, **8**, p. 1068, 1990.
- [9] M. SIMBO et T. MATSUO, J. Electrochem. Soc., **130**, p. 135, 1983.
- [10] Y.-L. SHEN, S. SURESH et I.A. BLECH, J. Appl. Phys., **80**, p. 1388, 1996.
- [11] D.E. BORNSIDE, *Mechanism for the Local Planarization of Microscopically Rough Surfaces by Drying Thin Films of Spin-Coated Polymer/Solvent Solutions*, J. Electrochem. Soc., **137**(8), pp. 2589-2595, 1990.
- [12] P. COLPANI et G. CARLOTTI, *1st Report on Physical Characterisation of Samples for Stress Measurements*, Deliverable D4, STREAM Project, 2000.
- [13] V. SENEZ, *Modélisation Bidimensionnelle de l'Oxydation du Silicium: Analyse Viscoélastique de la Relaxation des Contraintes*, Thèse de doctorat, USTL, 1995.
- [14] H. MIURA, N. ISHITSUKA, N. SAITO, H. OHTA, C. HASHIMOTO et S. IKEDA, *Stress Analysis of Transistor Structures Considering the Internal Stress of Thin Films*, JSME Int. J., **39**(2), pp. 166-171, 1996.
- [15] H. MIURA et A. NISHIMURA, *Effect of Phosphorus Doping on Crystallization-Induced Stress of Silicon Thin Films*, JSME Int. J., **39**(4), pp. 620-625, 1996.
- [16] C.-L. YU, P.A. FLINN et J.C. BRAVMAN, *In-situ Stress Measurements During Dry Oxidation of Silicon*, Mat. Res. Soc. Symp. Proc., **473**, pp. 95-100, 1997.
- [17] G. HETHERINGTON, K.H. JACK et J.C. KENNEDY, *The Viscosity of Vitreous Silica*, Phys. Chem. Glasses, **5**(5), pp. 130-136, 1964.
- [18] H.Z. MASSOUD, J.D. PLUMMER et E.A. IRENE, *Thermal Oxidation of Silicon in Dry Oxy-*

- gen Growth-Rate Enhancement in the Thin Regime*, J. Electrochem. Soc., **132**(11), pp. 2685-2699, 1985.
- [19] A. PONCET, *Accurate Simulation of Mechanical Stresses in Silicon during Thermal Oxidation*, Proc. SISDEP'93, **5**, p. 173, 1993.
- [20] H. PARK, P. SMEYS, Z.H. SAHUL, K.C. SARASWAT, R.W. DUTTON et H. HWANG, *Quasi-Three-Dimensional Modeling of Sub-Micron LOCOS Structures*, IEEE Trans. Semiconduct. Manufact., **8**(4), pp. 390-401, 1995.
- [21] S.K. JONES, M. AHMED, D.J. BAZLEY, R.J. BEANLAND, I. DEWOLF, C. HILL et W.J. ROTHWELL, *Characterisation of Mechanical Stresses of Device Isolation Structures by Micro-Raman Spectroscopy and Modelling*, ECS Symp. ALTECH, Leuven, Belgium, 1999.
- [22] S.K. JONES, A. PONCET, I. DEWOLF, M. AHMED et W.J. ROTHWELL, *An Advanced Calibration Method for Modelling Oxidation and Mechanical Stress in Sub-Micron CMOS Isolations Structures*, IEDM Tech. Dig., pp. 877-880, 1994.
- [23] K.F. DOMBROWSKI et B. DIETRICH, *Investigation of Stress in STI Using UV-Raman Spectroscopy*, Proceedings of ESSDERC'99, p. 196, 1999.
- [24] E.A. IRENE, H.Z. MASSOUD et E. TIERNEY, *Silicon Oxidation Studies: Silicon Orientation Effects on Thermal Oxidation*, J. Electrochem. Soc., **133**(6), pp. 1253-1256, 1986.
- [25] L.S. HUNG, J. GYULAI, J.W. MAYER, S.S. LAU et M.-A. NICOLETT, *Kinetics of TiSi₂ Formation by Thin Ti Films on Si*, J. Appl. Phys., **54**, p. 5076, 1983.
- [26] C.A. PICO et M.G. LAGALLY, *Kinetics of Titanium Silicide Formation on Single-Crystal Si: Experiment and Modeling*, J. Appl. Phys., **64**, p. 4957, 1988.
- [27] G.G. BENTINI, R. NIPOTI, A. ARMIGLIATO, M. BERTI, A.V. GRIGO et C. COHEN, *Growth and Structure of Titanium Silicide Phases Formed by Thin Ti Films on Si Crystals*, J. Appl. Phys., **57**, p. 270, 1985.
- [28] A. STEEGEN, I. DEWOLF et K. MAEX, *Characterization of the Local Mechanical Stress Induced During the Ti and Co/Ti Salicidation in sub-0.25 μ m Technologies*, J. Appl. Phys., **86**(8), pp. 4290-4297, 1999.
- [29] Q. XU et C. HU, *New Ti-SALICIDE Process Using Sb and Ge Preamorphization for Sub-0.2 μ m CMOS Technology*, IEEE Trans. Electron Dev., **ED-45**, pp. 2002-2009, 1998.
- [30] P. FORNARA, *Modélisation et Simulation Numérique de la Croissance des Siliciures pour la Microélectronique*, Thèse de doctorat, INPG, 1996.
- [31] H.-D. LEE, S.-G. LEE et J.-M. HWANG, *Characterization of Corner-Induced Leakage Current of a Shallow Silicided n+/p Junction for Quarter-Micron MOSFETs*, Jpn. J. Appl. Phys., **37**, pp. 1179-1183, 1998.
- [32] D.-B. KAO, M. MANLEY, C. BLAIR et G. SCOTT, *Two-Dimensional Effects in Titanium Silicidation*, IEEE Trans. Electron Dev., **ED-45**(1), pp. 187-193, 1998.
- [33] N. DE LANEROLLE, D. HOFFMAN et D. MA, *Titanium Silicide Growth by Rapid-Thermal*

- Processing of Ti Films Deposited on Lightly and Heavily Doped Silicon Substrates*, J. Vac. Sci. Technol. B, **5**(6), p. 1689, 1992.
- [34] V. MOROZ, K. LILJA et T. OKADA, *Modeling Self-Aligned Silicidation in 2D and 3D: Growth Suppression by Oxygen Diffusion*, Proc. of MRS, **611**, 2000 (à paraître).
- [35] C.S. RAFFERTY, L. BORUCKI et R.W. DUTTON, *Plastic Flow During Thermal Oxidation of Silicon*, **54**(16), pp. 1516-1518, 1989.
- [36] F.M. D'HEURLE et R. GHEZ, *Reactive Diffusion in a Prototype System: Nickel-Aluminium II: The Ordered Cu₃Au rule and the Sequence of Phase Formation, Nucleation*, Thin Solid Films, **215**, p. 26, 1992.
- [37] W. LIN, D.W. HILL, C.L. PAULNACK, M.J. KELLY et K.E. BENSON, *Misfit Stress and Dislocations in P/P+ Epitaxial Silicon Wafers: Effects and Elimination*, Proc. of the 2nd Symp. on Defects in Silicon, (Bullis, Gosele and Shimura Editors), The Electrochem. Soc., p. 163, 1991.
- [38] H.-J. HERZOG, L. CSEPREGI et H. SEIDEL, *X-Ray Investigation of Boron- and Germanium-Doped Silicon Epitaxial Layers*, J. Electrochem. Soc., **131**, pp. 2969-2974, 1984.
- [39] B. KLOECK et N.F. DEROOIJ, *Mechanical Sensors*, in *Semiconductor Sensors*, S. M. Sze, Ed. New York, NY: John Wiley and Sons, pp. 153-204, 1994.
- [40] K.E. PETERSON, *Silicon as a Mechanical Material*, Proceedings of the IEEE, **70**, pp. 420-457, 1982.
- [41] W.-H. CHU et M. MEHREGANY, *A Study of Residual Stress Distribution Through the Thickness of p+ Silicon Films*, IEEE Trans. Electron Dev., **ED-40**, pp. 1245-1250, 1993.
- [42] H. RUEDA, *Modeling of Mechanical Stress in Silicon Isolation Technology and its Influence on Device Characteristics*, Thèse de doctorat, Univ. of Florida, 1999.
- [43] D.S. GARDNER et P.A. FLINN, *Mechanical Stress as Function of Temperature in a Aluminium Films*, IEEE Trans. Electron Dev., **ED-35**, pp. 2160-2169, 1988.
- [44] A. WITVROUW, J. PROOST, P. ROUSSEL, P. COESEMANS et K. MAEX, *Stress Relaxation in Al-Cu and Al-Si-Cu Thin Films*, J. Mater. Res., **14**(4), pp. 1246-1254, 1999.
- [45] P.A. FLINN, D.S. GARDNER et W.D. NIX, *Measurement and Interpretation of Stress in Aluminum-Based Metallization as a Function of Thermal History*, IEEE Trans. Electron Dev., **ED-34**, pp. 689-698, 1987.
- [46] Y.-L. SHEN, *Thermal Stresses in Multilevel Interconnections: Aluminium Lines at Different Levels*, J. Mater. Res., **12**(9), pp. 2219-2222, 1997.
- [47] J. LEE et A.I. SAUTER MACK, *Finite Element Simulation of a Stress History During the Manufacturing Process of Thin Film Stacks in VLSI Structures*, IEEE Trans. Semiconduct. Manufact., **11**(3), pp. 458-464, 1998.
- [48] I.-S. YEO, P.S. HO et S.H. ANDERSON, *Characteristics of Thermal Stresses in Al(Cu) Fine Lines. I. Unpassivated Line Structures*, J. Appl. Phys., **78**(2), pp. 945-952, 1995.
- [49] TENCOR Instruments, *Application Note: Accurate Film Stress Measurement at 900°C*,

1993.

- [50] I.-S. YEO, P.S. HO et S.H. ANDERSON, *Characteristics of Thermal Stresses in Al(Cu) Fine Lines. II. Passivated Line Structures*, J. Appl. Phys., **78**(2), pp. 953-961, 1995.
- [51] A.I. SAUTER et W.D. NIX, *Thermal Stresses in Aluminium Lines Bonded to Substrates*, IEEE Trans. Semiconduct. Manufact., **15**(4), pp. 594-600, 1992.
- [52] Y.-L. SHEN, *Modeling of Thermal Stresses in Metal Interconnects: Effects of Line Aspect Ratio*, J. Appl. Phys., **82**(4), pp. 1578-1581, 1997.
- [53] J. LEMAITRE et J.-L. CHABOCHE, *Mécanique des Matériaux Solides*, Ed. Dunod, 1985.
- [54] P.S. PEERCY, *Trends in Semiconductor Equipment, Materials, and Processing Technology*, Tech. Dig. of IEDM, p. 14, 1998.
- [55] D.S. GARDNER, H.P. LONGWORTH et P.A. FLINN, *Detection of Reactions and Changes in Thin Film Morphology using Stress Measurements*, J. Vac. Sci. Technol. A, **10**, pp. 1426-1441, 1992.
- [56] S.M. HU, *Stress-Related Problems in Silicon Technology*, J. Appl. Phys., **70**(6), pp. R53-80, 1991.
- [57] J. VANHELLEMONT, S. AMELINCKX et C. CLAEYS, *Film-Edge-Induced Dislocation Generation in Silicon Substrates. II. Application of the Theoretical Model for Local Oxidation Processes on (001) Silicon Substrates*, J. Appl. Phys., **61**(6), pp. 2176-2188, 1987.
- [58] I.V. PEIDOUS, R. SUNDARESAN, E. QUEK, Y.K. LEUNG et M. BEH, *Impact of Silicon Wafer Material on Dislocation Generation in Local Oxidation*, Proc. of MRS, **532**, pp. 125-129, 1998.
- [59] S. MATSUDA, C. YOSHINO, H. NAKAJIMA et H. IWAI, *Three-Dimensional Mechanical Stress Analysis of Trench Isolation along {111} Gliding Planes*, IEDM Tech. Dig., pp. 885-888, 1994.
- [60] B. LEROY, *Critical Resolved Shear Stress for a Dislocation Loop Growth, Stability and Retrogrowth in Silicon: Application to the 16 MEG DRAM*, Solid State Phenomena, **57-58**, pp. 275-286, 1997.
- [61] B. LEROY et C. PLOUGONVEN, *Warpage of Silicon Wafers*, J. Electrochem. Soc., **127**(4), pp. 961-970, 1980.
- [62] R. PEIERLS, Proc. Phys. Soc., **52**, p. 34, 1940.

Chapitre VI : APPLICATIONS

Ce chapitre présente deux études qui analysent les contraintes mécaniques dans des édifices d'interconnexions de procédés industriels (PHILIPS Semiconducteurs, Caen, France). Ces travaux utilisent les modèles de calcul de contraintes présentés dans ce manuscrit ainsi que leur calibration.

La première application concerne l'étude d'une rupture de ligne métallique observée pour des géométries spécifiques d'interconnexions. L'outil numérique permet d'établir une cartographie précise des champs de contraintes, et facilite ainsi le diagnostic de la défaillance.

La deuxième application porte sur l'analyse des défaillances mécaniques des films d'oxyde SOG lors de leur densification. L'analyse numérique permet de quantifier l'impact d'une modification de certains paramètres du procédé afin de circonvier à ces défaillances.

Les contraintes simulées sont représentées soit sous la forme de champs bidimensionnels, soit sous la forme de profils 1D. Dans le premier cas, comme l'épaisseur du substrat simulé doit être grande (cf. annexe), les résultats présentés correspondent à des zooms.

VI.1 Caractérisation des films minces des procédés étudiés

En étudiant la modélisation des principales sources de contraintes mécaniques que nous avons développée dans ce travail, on a pu constater que certains modèles adoptent une approche empirique, notamment pour le calcul des contraintes intrinsèques. En effet, ces contraintes sont extrêmement sensibles aux paramètres du procédé de dépôt du film, ce qui rend leur modélisation très délicate. Il est alors nécessaire d'avoir recours à une caractérisation complète de la contrainte intrinsèque de chaque film, au préalable à toute étude structurale. Le tableau VI.1 donne les caractéristiques de dépôt des films utilisés pour les deux procédés étudiés. On peut noter que certains films possèdent des contraintes intrinsèques différentes suivant leur épaisseur. C'est notamment le cas des alliages d'aluminium. Cette observation est cohérente avec la dépendance en épaisseur de la limite d'élasticité des alliages que nous avons mis en évidence au chapitre précédent.

Les épaisseurs indiquées dans ce tableau correspondent à celles effectivement utilisées dans les procédés étudiés.

Notons enfin que l'oxyde SOG étant, par définition, pelliculé à l'état liquide à température ambiante, aucune contrainte n'est générée initialement dans le film.

Tableau VI.1: Caractéristiques des films minces des édifices d'interconnexions [1].

Film	Equipement	Epaisseur du film [μm]	Température de dépôt [$^{\circ}\text{C}$]	σ_{int} [MPa]
USG	PECVD	0.300	400.	-35
		0.500	400.	-25
PSG (4%P)	PECVD	0.600	450.	+80
Nitrure	PECVD	0.800	400.	-35
	LPCVD	0.070	800.	+110
SOG	pelliculage	-	25.	0.
AlCu	pulvérisation	0.300	450.	+210
		0.670	450.	+65
		0.950	450.	+48
AlSiCu (2%)	pulvérisation	0.670	300.	+120
TiW	pulvérisation	0.130	300.	-690

VI.2 Analyse des contraintes dans le procédé SUBILO

La première application étudiée de façon qualitative les contraintes générées lors de la réalisation du premier niveau de métallisation d'une technologie bipolaire $3\mu\text{m}$ (SUBILO) utilisée sur le site de PHILIPS Semiconducteurs à Caen.

L'objectif de cette analyse est d'aider au diagnostic d'une défaillance mécanique survenue récemment sur ce procédé relativement ancien et bien stabilisé. Pour ce faire, nous décrivons tout d'abord le problème rencontré, puis les principales étapes technologiques génératrices de contraintes élevées. La sensibilité de la défaillance à la géométrie est ensuite investiguée, en considérant quatre motifs spécifiques. La simulation de la fabrication de ces motifs permet alors de quantifier l'effet des contraintes sur l'apparition des défaillances. Enfin, l'effet d'une modification de certains paramètres du procédé pour réduire les contraintes est évalué.

VI.2.1 Position du problème

La défaillance constatée lors de la réalisation du premier niveau de métal de ce procédé est illustrée à la figure VI.1. Cette défaillance correspond à la génération de cloques au niveau du film d'adhésion de TiW, localisées dans la région de la tête d'oiseau du LOCOS enterré. Ces cloques induisent une rupture partielle ou complète de la ligne métallique, et donc conduisent à un dysfonctionnement électrique du dispositif. Avant même l'entame de cette étude, le précurseur de ces défaillances avait été identifié (problème lié à des résidus organiques de

gravure lors d'un bain de rinçage [2]). Cependant, comme une rupture mécanique est le résultat d'un mécanisme de relaxation de contraintes trop élevées, le calcul des contraintes de cette structure va compléter notre connaissance et permettre une optimisation plus efficace du procédé.

La figure VI.1 montre également la topographie simulée correspondante au motif d'étude. Il est important de simuler la structure avec la plus grande précision possible car l'apparition bien localisée des cloques (voisinage des têtes d'oiseau) indique une prépondérance de l'effet géométrique pour leur génération. La couche qui apparaît au-dessus de la ligne d'AlCu sur la photographie est déposée après l'apparition du craquement, son rôle étant uniquement de repérer plus facilement la topographie de la ligne d'AlCu.

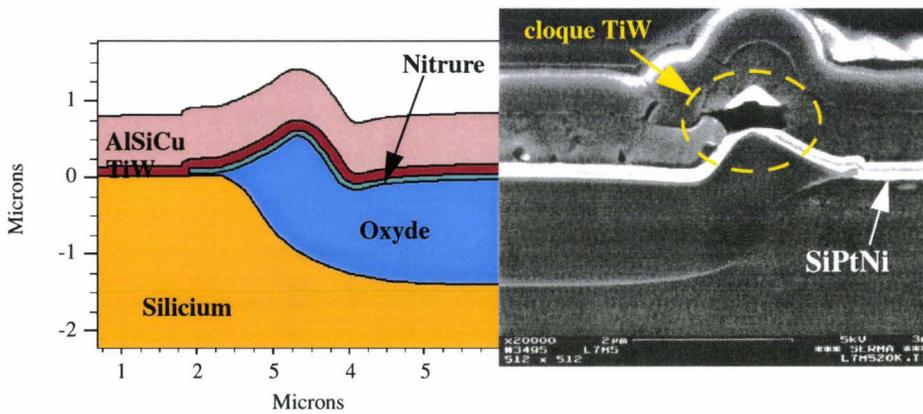


Figure VI.1: Motif du SUBILO mettant en évidence une cloque du film de TiW au niveau de la tête d'oiseau du LOCOS enterré.

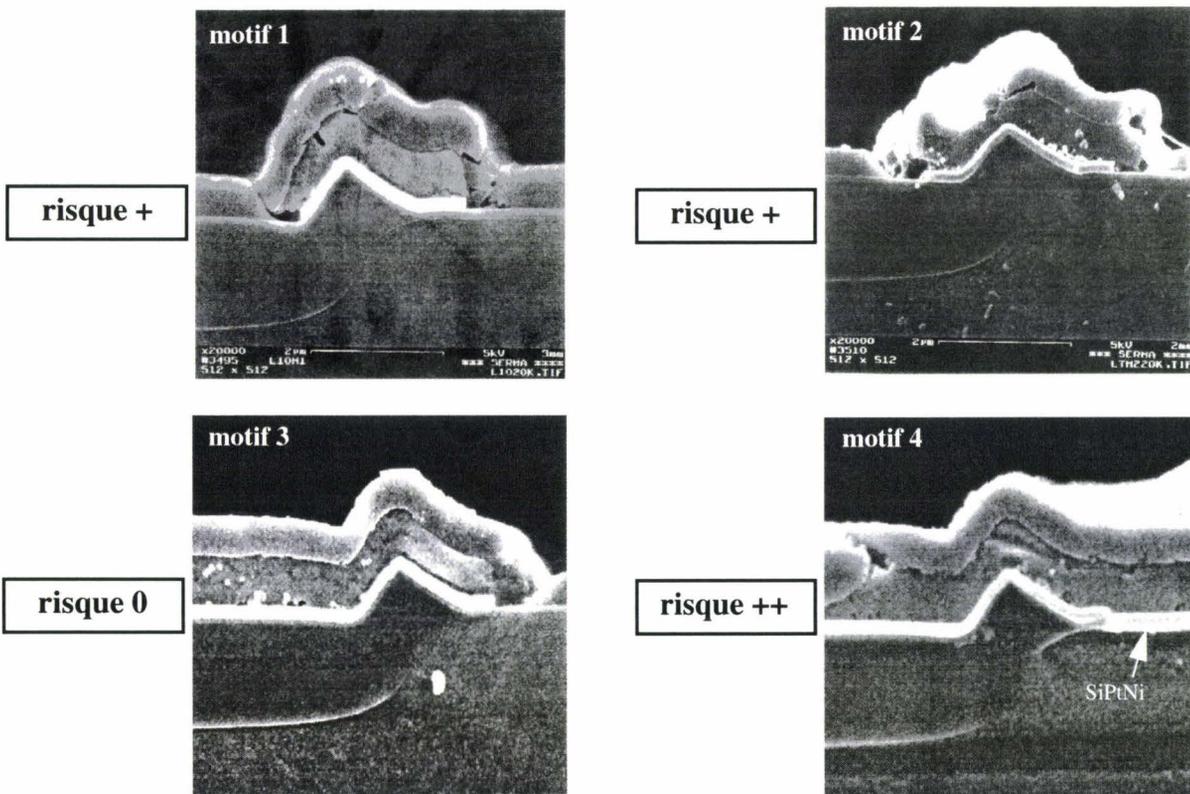


Figure VI.2: Motifs étudiés pour évaluer le risque d'apparition des cloques.

Notons dès à présent que certaines simplifications ont été réalisées pour simuler les structures. Ainsi, la croissance du siliciure SiPtNi n'est pas prise en compte, le modèle de siliciuration n'existant pas au moment de l'étude. Comme nous avons pu constater précédemment que l'étape de siliciuration constitue une source potentielle importante de contraintes, il est nécessaire de garder à l'esprit cette limitation lors de l'interprétation des résultats. D'autre part, il est reconnu que la nucléation de craquements de lignes est le plus souvent initiée à l'intersection des joints de grains avec l'interface sous-jacents [3,4]. Ce mécanisme ne peut pas être considéré dans cette étude, étant donné que la croissance des grains de l'alliage AlSiCu n'est pas modélisée. Enfin, le calcul des champs de contraintes est réalisé en 2D. La géométrie de la structure est trop complexe pour pouvoir la simuler en trois dimensions. L'hypothèse des déformations planes est supposée, ce qui signifie que les lignes métalliques sont considérées comme infiniment larges perpendiculairement au plan de simulation. Or, la ligne métallique de la structure peut être plus ou moins large dans cette direction. Cette approximation justifiera également certaines précautions quant aux interprétations des résultats.

Pour analyser en détails l'influence de la géométrie de la structure sur l'apparition des cloques, quatre motifs différents sont considérés (figure VI.2). La principale différence entre ces motifs porte sur la longueur de la ligne métallique. Le motif 1 correspond à la ligne la plus courte. Pour les trois premiers motifs, le bord droit de la ligne est toujours à la même position, et seul le bord gauche varie. Pour le quatrième motif, la ligne peut être considérée comme infiniment longue et le bicouche oxyde/nitride est gravé à droite de l'abscisse correspondant au bord droit de la ligne des autres motifs (ouverture pour réaliser la siliciuration). La génération des cloques apparaît principalement pour le quatrième motif. Moins de cloques sont décelées sur les deux premiers motifs, et aucune cloque n'a été observée pour le troisième. Ces constatations renforcent l'hypothèse d'un effet géométrique.

VI.2.2 Description du procédé technologique

Le procédé technologique à simuler comprend la formation de la structure d'isolation (LOCOS enterré), le dépôt d'un bicouche oxyde/nitride, et la réalisation du premier niveau de métallisation (couche d'adhésion TiW + alliage AlSiCu).

Les données technologiques relatives à ces différentes étapes du procédé sont reportées à la figure VI.3. Pour chaque étape, la simulation prend en compte les variations thermiques de la température ambiante jusqu'à la température de travail, 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 des différents modèles nécessaires à la simulation permet d'évaluer quantitativement les niveaux de contrainte observés pour cette technologie.

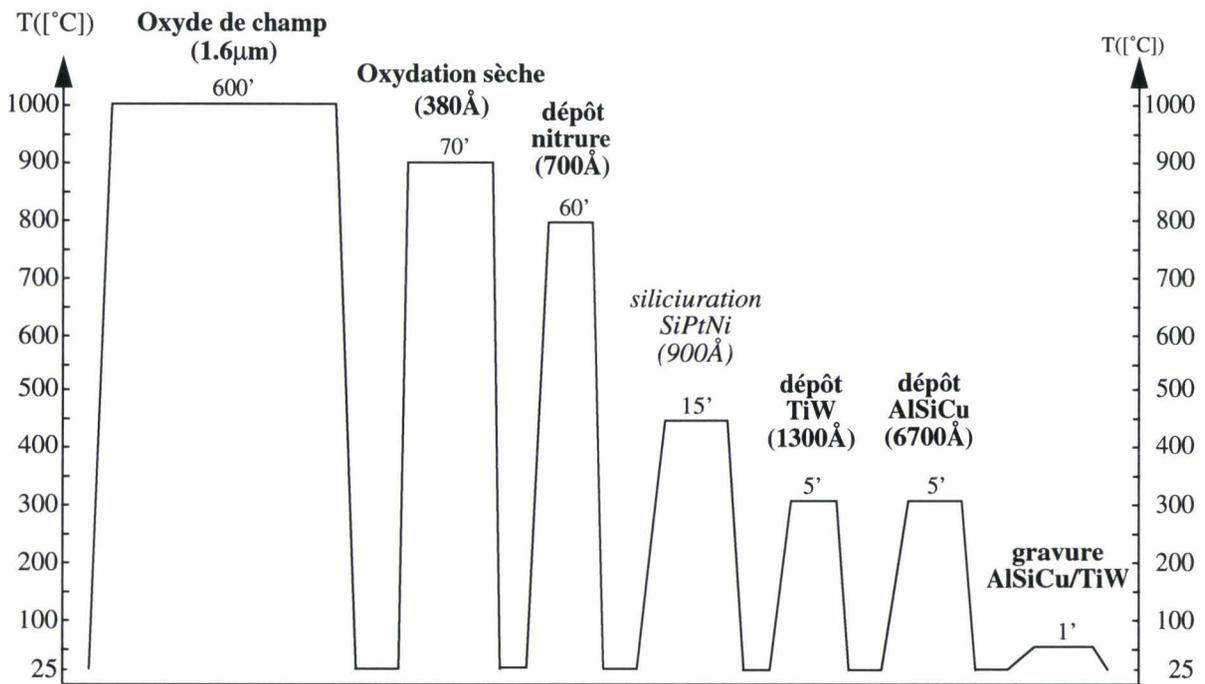


Figure VI.3: Description des principales étapes du procédé SUBILO (NB: pour l'étape de siliciuration, seules les variations thermiques sont simulées).

VI.2.3 Mécanismes physiques responsables des cloques

Pour mieux comprendre les mécanismes physiques mis en jeu dans le processus de formation des cloques, on s'intéresse au motif le plus critique (i.e., motif 4). La figure VI.4 représente les champs de contraintes normales (latérales σ_{xx} et verticales σ_{yy}) à la fin de la formation du premier niveau de métal.

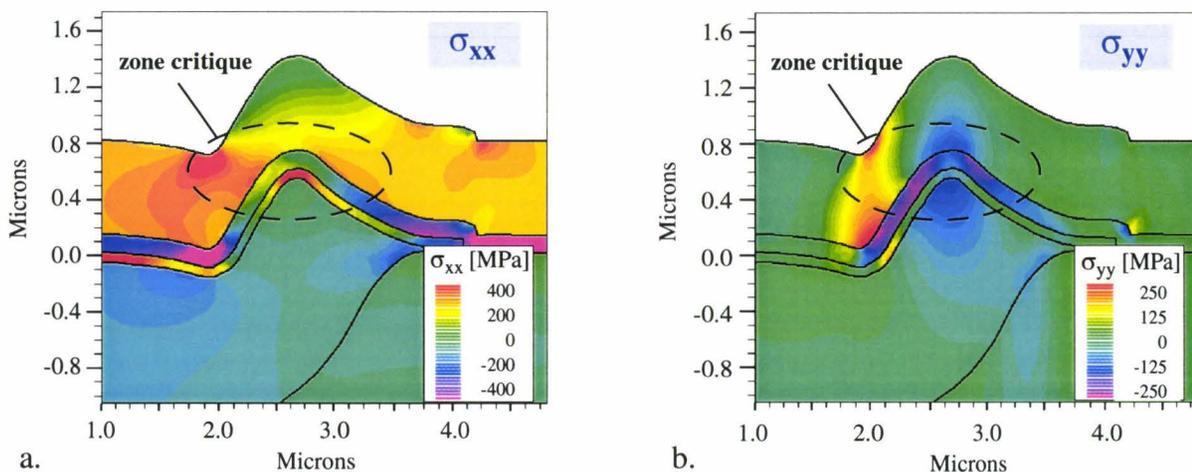


Figure VI.4: Contraintes normales (latérales (a) et verticales (b)) pour le motif 4.

D'un point de vue général, les coins et les angles issus de topographies perturbées constituent nécessairement des régions de contraintes importantes. En conséquence, elles définissent des lieux préférentiels de nucléation de craquement et/ou de délamination (i.e., décollement de film). Nous focalisons donc notre attention sur ces régions et plus spécifiquement sur le voisinage de la tête d'oiseau de l'isolation.

A partir des résultats de la figure VI.4, on constate que le film de nitrure est en forte tension latéralement (σ_{xx}) et que le film de TiW est en forte compression verticalement (σ_{yy}), de part et d'autre de la tête d'oiseau. La tension traduit une contraction du nitrure juste au sommet de la tête. Par contre, si l'adhésion n'est pas parfaite entre le TiW et le nitrure au sommet de la tête d'oiseau (i.e., existence d'un décollement), la compression du film de TiW aura tendance à amplifier le décollement de ce film de l'angle convexe formé par la topographie sous-jacente. Les forces équivalentes traduisant ces efforts internes sont illustrées à la figure VI.5. Les forces sont concentrées aux points d'applications correspondants aux contraintes maximales.

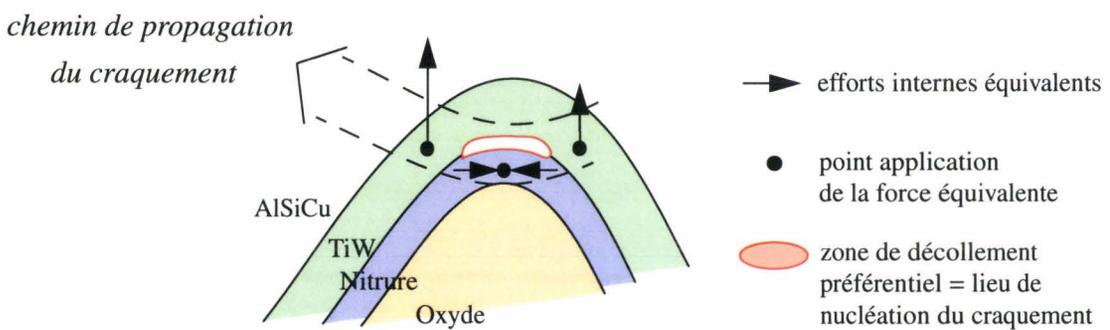


Figure VI.5: Interprétation des efforts intérieurs induits dans le motif 4.

Il s'agit donc de déterminer pourquoi un décollement du film de TiW peut se produire au sommet de la tête d'oiseau.

Le dépôt du film de TiW constitue naturellement l'étape la plus critique quant à la qualité de l'adhésion avec le film de nitrure sous-jacent. La figure VI.6 représente les champs de contraintes normales (latérales σ_{xx} et verticales σ_{yy}) juste après dépôt du film de TiW, avant le refroidissement de la température de dépôt à la température ambiante. Les échelles de contraintes ont volontairement été limitées à celles utilisées à la figure VI.4 pour mettre en évidence les niveaux très élevés de contraintes juste après dépôt. En comparant les figures VI.4 et VI.6, on remarque que les champs de contraintes verticales (σ_{yy}) ont qualitativement les mêmes caractéristiques, ce qui n'est pas le cas des contraintes latérales (σ_{xx}). En effet, on note que le film de TiW est fortement en compression juste après son dépôt, et ce même au sommet de la tête d'oiseau. Or, un état de compression pour un film déposé sur une surface convexe constitue une configuration favorable au décollement de ce film.

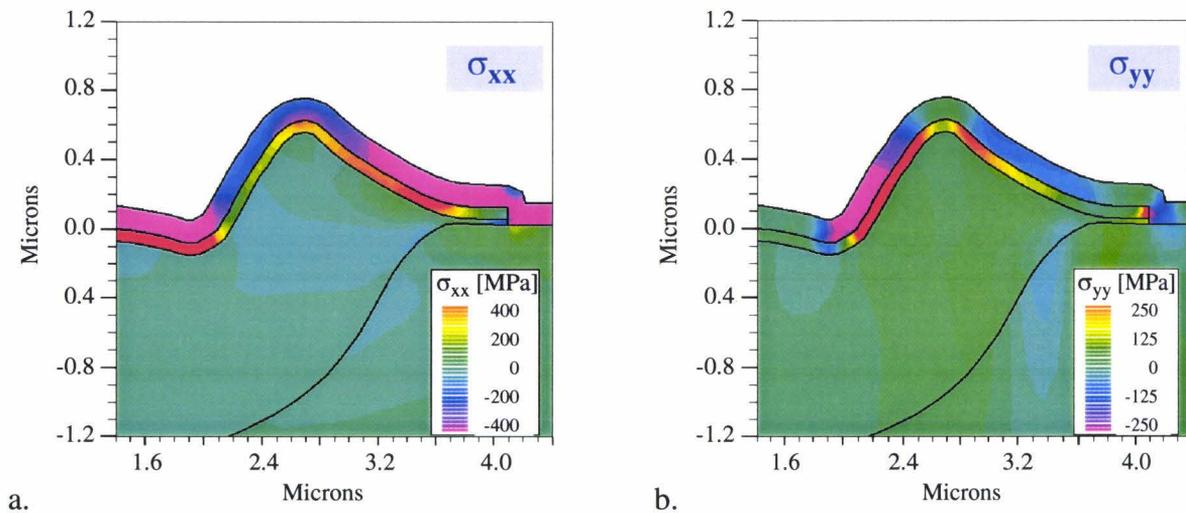


Figure VI.6: Contraintes normales (latérales (a) et verticales (b)) pour le motif 4 (Calcul juste après le dépôt du TiW).

Autrement dit, plus le film de TiW est comprimé (ou plus précisément, plus il existe une discontinuité importante d'efforts entre le nitrure et le TiW) et plus la surface est convexe, plus le risque de décollement du film de TiW s'accroît.

Une fois le craquement initié à l'interface TiW/nitrure, il se propage dans le film de TiW et débouche à travers l'alliage d'AlSiCu pour relâcher sa tension, en suivant pour cela les lignes de plus fortes contraintes en tension. Comme les contraintes (en compression pour le TiW et en tension pour l'AlSiCu) sont les plus importantes à gauche de la tête d'oiseau, le chemin de propagation préférentiel du craquement est orienté vers la gauche.

Les autres motifs sont à présent analysés. Les champs de contraintes latérales (σ_{xx} et verticales (σ_{yy}) des quatre motifs sont représentés aux figures VI.7 et VI.8, respectivement.

A partir de la figure VI.7, on constate que les longues lignes de métal induisent des contraintes en tension plus importantes au voisinage de la tête d'oiseau, et ce pour tous les films (nitrure, TiW et AlSiCu). On peut donc en conclure que la gravure est une étape essentielle pour la relaxation des contraintes des films. Ainsi, la tension latérale de la ligne d'AlSiCu est presque entièrement relaxée pour le motif 1. En conséquence, aucune cloque ne devrait être observée pour cette structure.

Concernant les contraintes verticales (figure VI.8), les champs sont très semblables pour les quatre motifs, à l'exception du film de TiW. Seule la géométrie du motif 1 permet une relaxation significative des contraintes compressives du film de TiW à gauche de la tête d'oiseau.

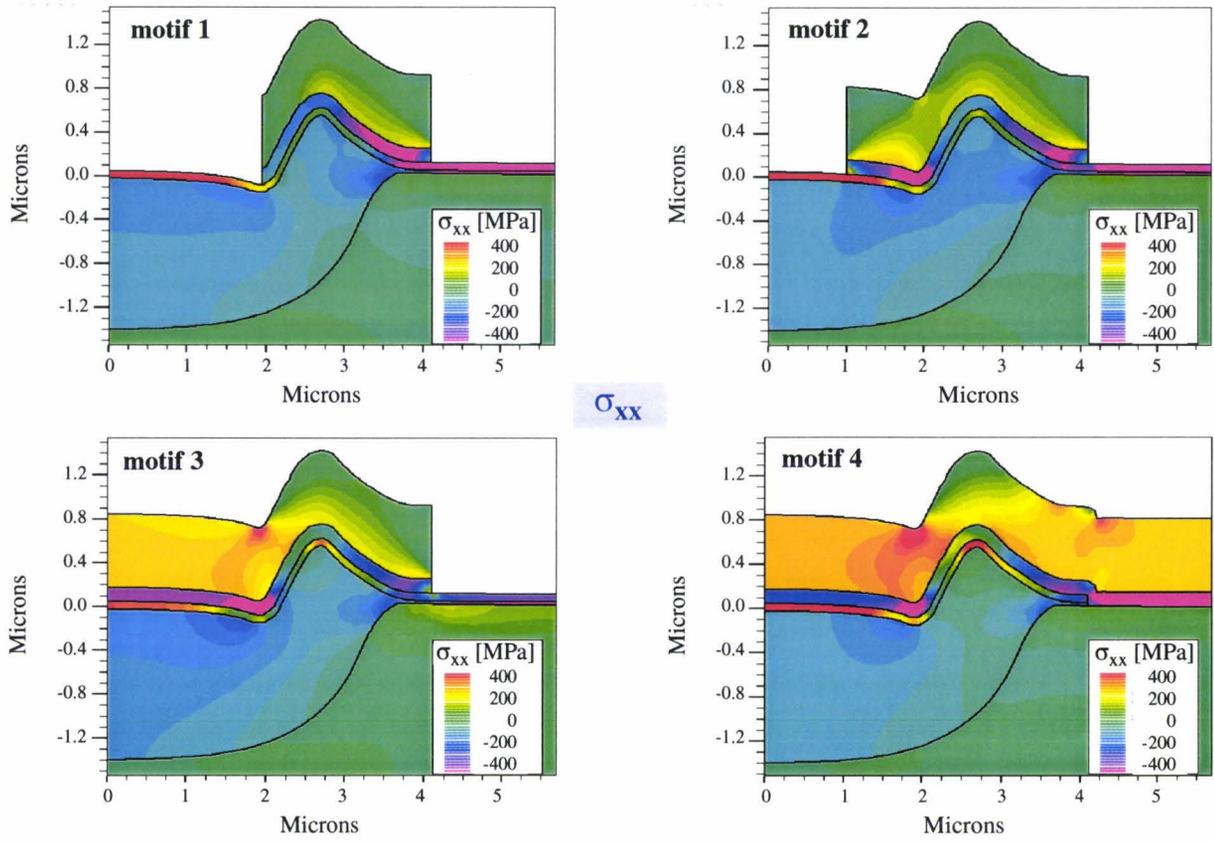


Figure VI.7: Champs de contraintes latérales (σ_{xx}) pour les quatre motifs.

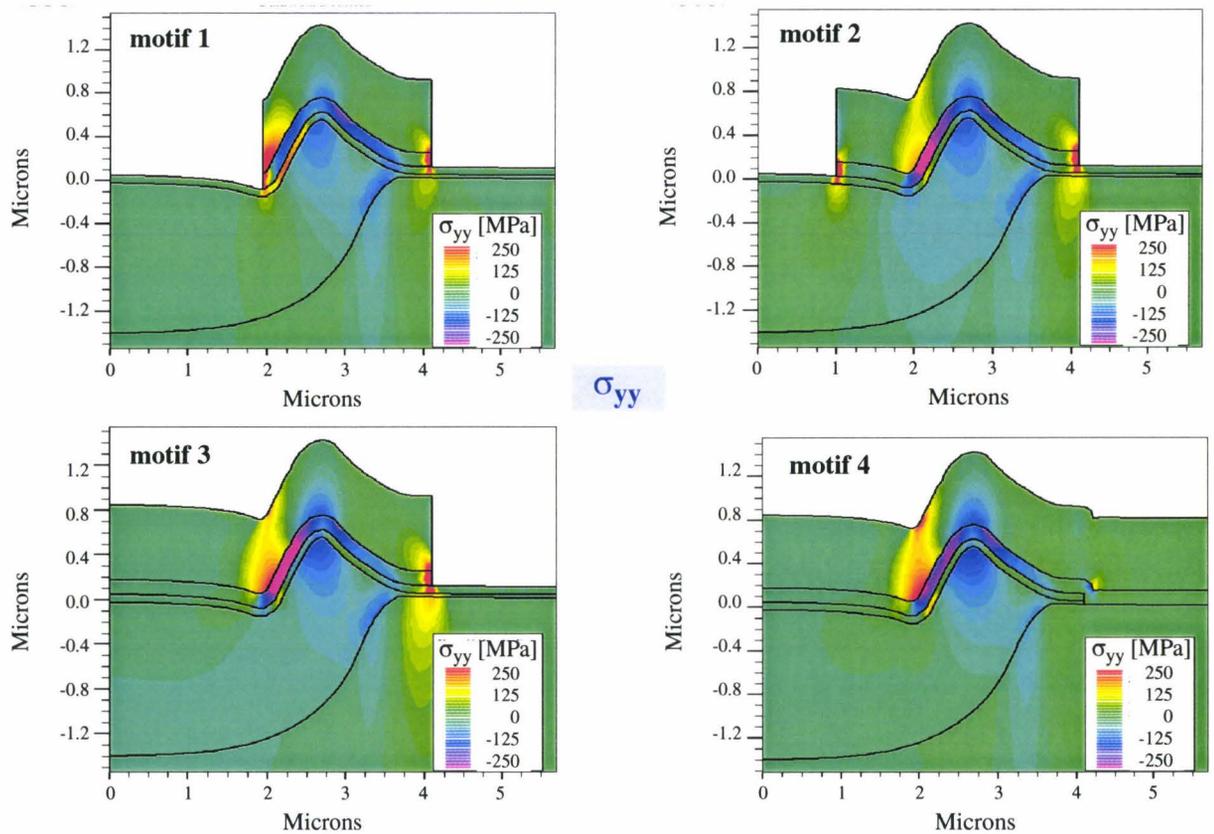


Figure VI.8: Champs de contraintes verticales (σ_{yy}) pour les quatre motifs.

Essayons de comprendre maintenant en quoi le motif 4, et dans une moindre mesure les motifs 1 et 2, sont plus susceptibles de produire des fissures que le motif 3 (cf. figure VI.2).

Les résultats de relaxation des contraintes pour les différents motifs sont obtenus en ne considérant pas de décollement pré-existant entre le TiW et le nitrure. Néanmoins, si ce décollement existe effectivement au sommet de la tête d'oiseau, l'amplitude de la relaxation induite par la gravure de la ligne métallique peut avoir une conséquence directe sur l'élargissement du décollement (jusqu'à formation d'une fissure comme à la figure VI.1). Un tel mécanisme justifierait que les deux premiers motifs soient plus susceptibles de voir apparaître des cloques que le troisième, mais la ligne métallique du quatrième motif n'étant pas gravée, aucune cloque ne devrait être engendrée pour ce motif (aucune relaxation observée sur les champs de contraintes). Néanmoins, l'hypothèse des déformations planes qui est considérée pour ces simulations 2D suppose que les lignes sont infiniment longues perpendiculairement au plan de simulation. Cette configuration correspond effectivement à la réalité pour les trois premiers motifs, mais pas pour le quatrième (la ligne est étroite dans ce cas). Pour ce motif, la relaxation des contraintes à l'origine des fissurations ne peut être mise en évidence qu'avec une analyse tridimensionnelle. Cependant, comme nous l'avons précisé dans l'introduction de ce manuscrit, il n'existe pas encore à l'heure actuelle de simulateur 3D de procédés technologiques qui puisse simuler l'ensemble des étapes d'un procédé. C'est pourquoi nous n'avons pas réalisé cette étude complémentaire.

En conclusion, l'analyse fine des contraintes générées au voisinage de la tête d'oiseau permet de mettre en lumière le rôle moteur des contraintes sur la propagation des cloques. Néanmoins, les différences des distributions de contraintes obtenues par une analyse 2D en faisant l'hypothèse des déformations planes n'est pas suffisante pour justifier complètement en quoi le motif 4 (et dans une moindre mesure les motifs 1 et 2) présente un risque d'apparition de cloques, et pas le motif 3.

VI.2.4 Optimisation du dépôt du film de TiW

VI.2.4.1 Contrainte intrinsèque du TiW

Toutes les contraintes intrinsèques des films sont extraites à partir de dépôts "pleine plaque". Dans le cas du film de TiW, une contrainte d'environ -1GPa avait été mesurée initialement. Après l'apparition récente de la défaillance, une nouvelle mesure a ramené cette contrainte à -690MPa [2]. Cette variation est supposée provenir des dérives de certains paramètres des équipements de dépôt. En effet, la procédure de dépôt du film de TiW est complexe: le film n'est pas déposé en une fois comme la plupart des films, mais le dépôt est effectué en une trentaine de passes. Il possède alors une structure stratifiée composée de 30 couches élémentaires. Par ailleurs, la cinétique de dépôt est rapide comparée à la faible mobilité des atomes arrivant en surface du film en croissance. Si le film peut être déposé en 3 ou 4 passes, des réarrangements atomiques internes au film ont le temps de se produire, ce qui permet d'obtenir une contrainte intrinsèque plus faible qu'avec un film fortement stratifié.

Intuitivement, une structure stratifiée peut être considérée comme mécaniquement moins stable qu'un film uniforme. Cette hypothèse sera confirmée au paragraphe suivant.

En première approximation, on considère que le film de TiW est idéalement déposé en une seule passe (i.e., non-stratifié) et on analyse l'influence de sa contrainte intrinsèque sur les champs de contraintes résiduelles à la fin de la réalisation du motif. Les figures VI.9 et VI.10 correspondent aux champs de contraintes latérales et verticales pour le motif 4 et pour trois valeurs de contrainte intrinsèque du TiW: $\sigma_{int} = -1\text{GPa}$ pour le pire-cas, $\sigma_{int} = 0$. pour un réarrangement complet durant le dépôt (cas idéal), et $\sigma_{int} = -690\text{MPa}$ pour la valeur nominale. On observe qu'une variation de cette contrainte intrinsèque modifie de manière importante l'état de contraintes des films sous-jacents, et plus particulièrement le film de nitrure qui est directement en contact avec le TiW. On constate en outre qu'une augmentation de la compression intrinsèque du TiW induit, par réaction, un état de tension plus important dans le film de nitrure.

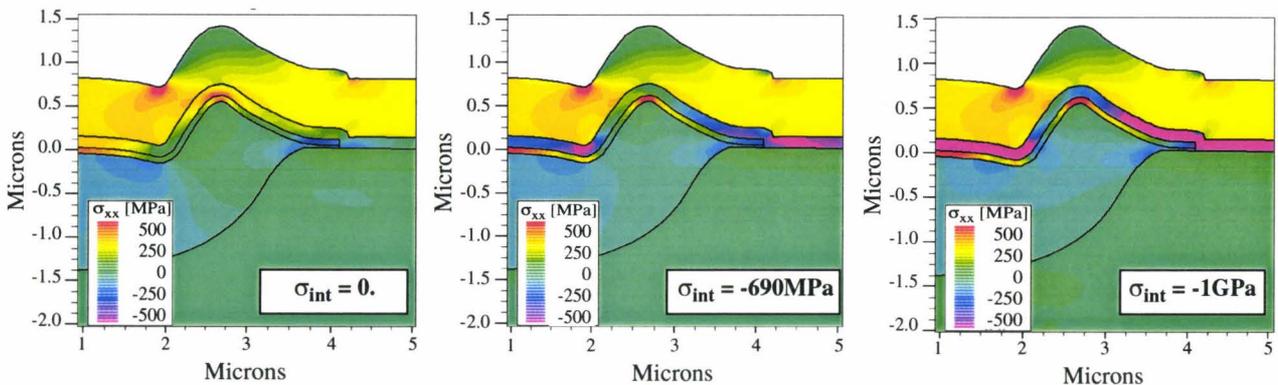


Figure VI.9: Contraintes latérales (σ_{xx}) pour trois contraintes intrinsèques du TiW.

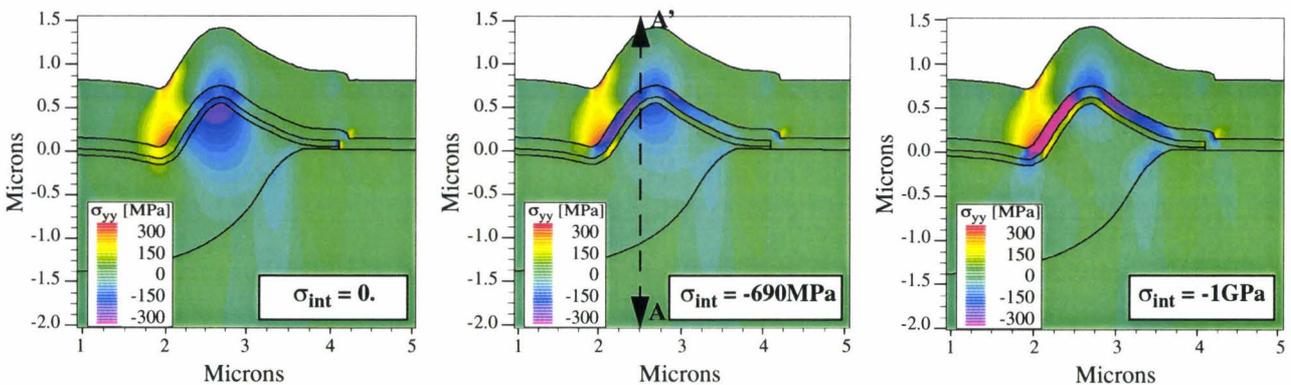


Figure VI.10: Contraintes latérales (σ_{yy}) pour trois contraintes intrinsèques du TiW.

Pour avoir une meilleure appréciation de la modification des contraintes résiduelles, une coupe 1D est réalisée pour chaque motif à l'abscisse $x = 2.5\mu\text{m}$ (cf. ligne AA' à la figure VI.10). Les résultats de comparaison pour les deux composantes de contraintes sont reportés à la figure VI.11. Ces courbes confirment l'effet de tension supplémentaire induite dans le nitrure si la compression intrinsèque du TiW augmente.

La discontinuité de contraintes aux interfaces, représentant l'un des principaux

paramètres caractérisant l'adhésion mécanique entre les couches, s'accroît de façon dramatique lorsque la contrainte intrinsèque compressive du TiW augmente. Dans le pire-cas ($\sigma_{int}(TiW) = -1GPa$), les discontinuités à l'interface TiW/nitride atteignent $\sim 500MPa$ latéralement et $\sim 400MPa$ verticalement. De plus, on peut remarquer que ces discontinuités de contraintes latérales et verticales changent de signe lorsque que la contrainte intrinsèque du TiW augmente: elles sont positives pour $\sigma_{int}(TiW) = -1GPa$ et $\sigma_{int}(TiW) = -690MPa$, et négatives pour $\sigma_{int}(TiW) = 0$. On a calculé et vérifié par simulation que ces discontinuités s'annulent pour une contrainte intrinsèque du TiW d'environ $-320MPa$.

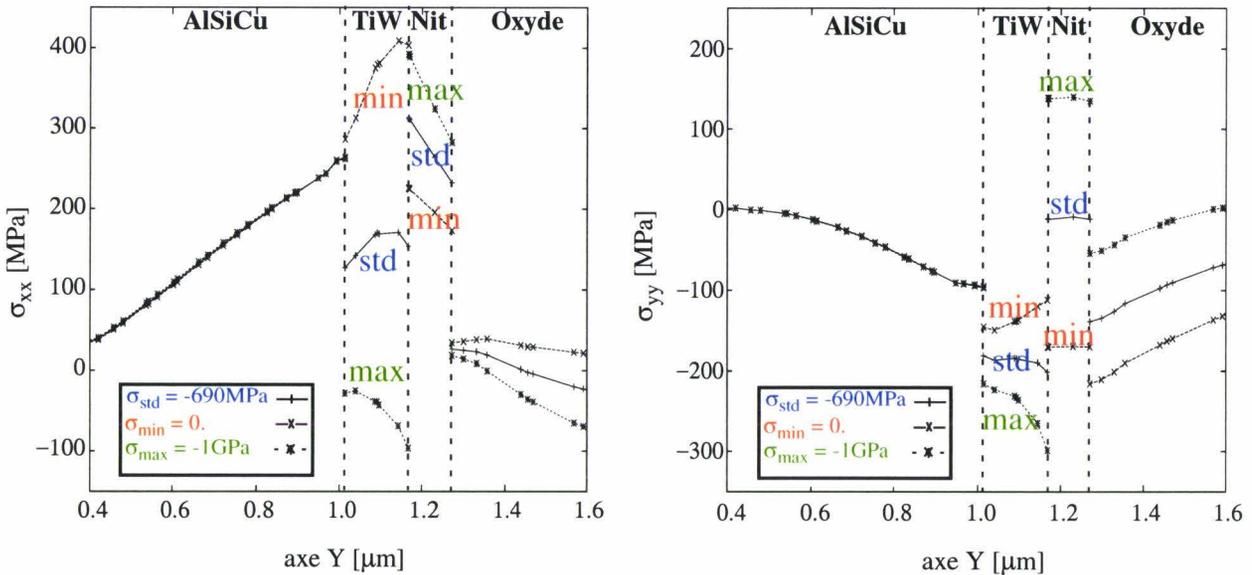


Figure VI.11: Contraintes normales (σ_{xx} et σ_{yy}) pour une coupe 1D en $x = 2.5\mu m$.

En conséquence, une réduction de la contrainte intrinsèque compressive du film de TiW peut être envisagée pour réduire les risques d'apparition de cloques de la ligne métallique. Les gradients de contraintes entre les films de TiW et de nitride seront minimisés si cette contrainte intrinsèque est contrôlée dans la gamme $[-300MPa, -350MPa]$.

VI.2.4.2 Stratification du TiW

Afin de prendre en compte la stratification du film de TiW, on adopte un modèle relativement simple. On considère qu'une fine couche d'oxyde natif (10\AA) est créée entre chaque couche élémentaire de TiW. Il n'y a pas d'évidence physique justifiant l'existence de cet oxyde natif. Ceci étant, cet artefact est nécessaire d'un point de vue numérique pour isoler chaque couche les unes des autres. Par ailleurs, toutes ces couches élémentaires sont considérées mécaniquement équivalentes (i.e., modules d'Young, coefficients de Poisson, coefficients de dilatation thermique et contraintes intrinsèques identiques). Comme la technique de mesure par déflexion de plaque ne donne que la valeur moyenne de la contrainte présente dans le film, cette valeur correspond donc à la moyenne des contraintes intrinsèques de toutes les couches élémentaires.

Pour analyser quantitativement l'effet de la stratification, le film de TiW est déposé en quatre passes (i.e., quatre couches élémentaires), avec aucune variation de température entre

chaque étape de dépôt.

La figure VI.12 représente les champs de contraintes normales du motif 4 et la figure VI.13 montre les coupes 1D de contraintes prises à $x = 2.5\mu\text{m}$, comme précédemment. Dans les deux cas, les échelles ont été prises identiques à celles des figures VI.4 et VI.11, de manière à faciliter la comparaison avec le cas du film non-stratifié.

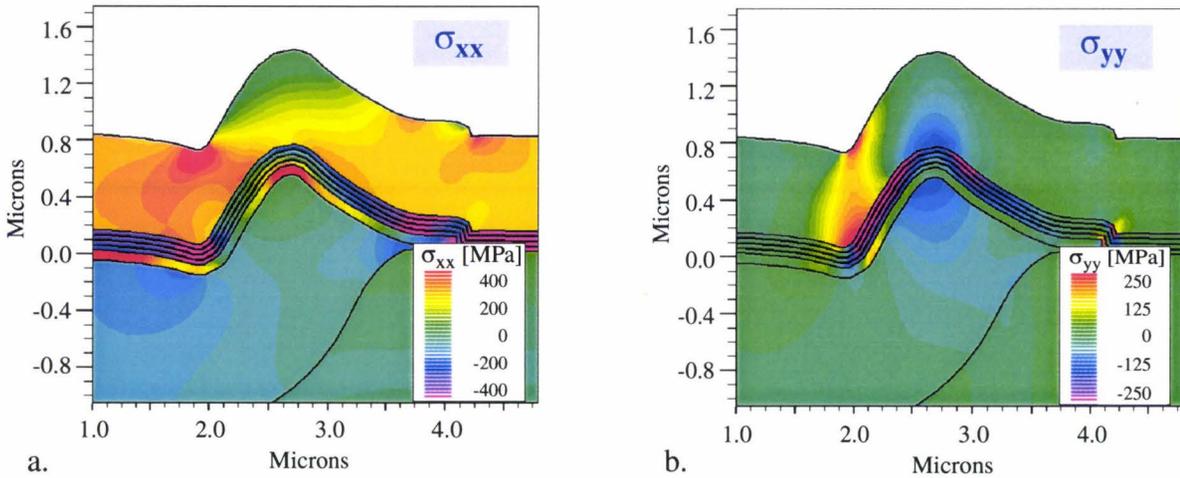


Figure VI.12: Contraintes normales (latérales (a) et verticales (b)) pour le motif 4. Le film de TiW est stratifié en 4 couches élémentaires.

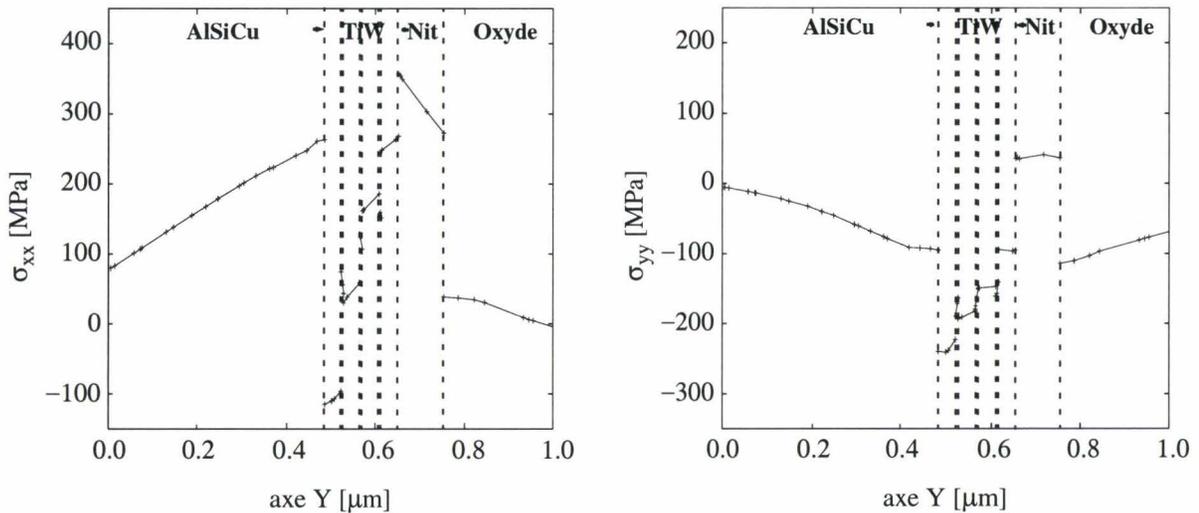


Figure VI.13: Contraintes normales (σ_{xx} et σ_{yy}) pour une coupe 1D en $x = 2.5\mu\text{m}$. Le film de TiW est stratifié en 4 couches élémentaires.

Tout d'abord, on observe à partir des distributions 2D que les contraintes en tension du nitrure sont substantiellement plus élevées que pour un film uniforme (σ_{xx} et σ_{yy}). La comparaison des coupes 1D confirme cet état de fait. Mais la principale différence concerne les contraintes du film de TiW. Cela provient du re-équilibrage des forces effectué après le dépôt de chaque couche élémentaire: lorsqu'une nouvelle couche de TiW est déposée, sa contrainte compressive induit par réaction une tension dans les couche sous-jacentes. De ce fait, la toute première couche élémentaire peut passer en tension à la fin de la séquence de dépôt, comme cela

est constaté pour la contrainte latérale à la figure VI.13. Cependant, il doit être fait mention qu'aucun phénomène de frottement et/ou de glissement aux interfaces n'est pris en compte (i.e., interfaces idéales). En conséquence, la variation de contraintes induite par réaction lors du dépôt d'une nouvelle couche peut être surestimée.

En résumé, les contraintes à travers l'épaisseur du film de TiW sont fortement non-uniformes (particulièrement dans la région de la tête d'oiseau). Etant donné que les couches élémentaires définissant la structure stratifiée sont extrêmement fines, de telles discontinuités de contraintes favorisent considérablement l'apparition de craquements dans le film. Une technique de dépôt du film minimisant la stratification est donc préférable.

VI.3 Analyse des craquements de film pour un procédé BiCMOS

La seconde application que nous présentons à présent concerne l'évaluation des contraintes mécaniques induites dans les édifices d'interconnexions d'une technologie BiCMOS 0.8 μ m (QUBiC) utilisé sur le site de Philips Semiconducteurs à Caen.

L'étude porte plus spécifiquement sur l'origine des niveaux élevés de contraintes qui peuvent être à l'origine des craquements observés pour certains films. Une fois identifiées les étapes critiques du procédé responsables des défaillances, une optimisation de certains paramètres technologiques est menée afin de les minimiser.

VI.3.1 Position du problème

Dans le procédé QUBiC étudié, un des problèmes rencontrés périodiquement est la fissuration des couches isolant le second et le troisième niveau métallique. Un exemple caractéristique de cette défaillance est illustré sur la photographie MEB à la figure VI.14. On observe ainsi l'apparition de craquement qui prend naissance dans la couche de SOG et débouche dans le film de PSG. La présence de bandes d'AlCu crée un relief perturbé qui rend le film de SOG plus épais à cet endroit. L'apparition de ce type de fissure est constaté au moment du dépôt du film de PSG, juste après l'étape de densification du film de SOG. Ces étapes, sources potentielles de contraintes, sont donc supposées être responsables de la défaillance.

D'un point de vue expérimental, il a été constaté que lorsque la température de densification du SOG dépasse 450°C, le risque de création de ce défaut devient important [1]. Des expériences montrent qu'un pic de température de 470°C provoque systématiquement une fissuration dans les zones fragilisées.

La difficulté pour résoudre ce problème provient à la fois de la multitude des causes possibles et de la non-reproductibilité de ce défaut. Dans ces conditions, il n'est pas possible d'effectuer une étude purement expérimentale basée sur un plan d'expérience. Elle ne peut donc s'appuyer que sur des observations relayées par la simulation.

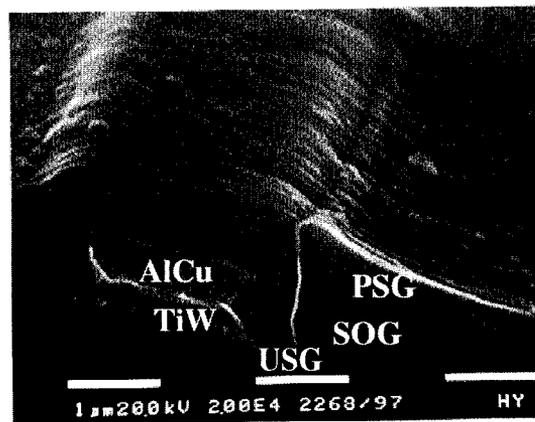


Figure VI.14: Photographie MEB du défaut qui prend naissance dans la couche de SOG et débouche dans le film de PSG.

VI.3.2 Description du procédé technologique

L'étude portant sur l'analyse d'une défaillance au niveau des couches isolantes inter-métalliques, nous ne considérons que les étapes technologiques de formation des structures d'interconnexions (*back-end*). On suppose donc que le silicium est initialement parfaitement plan et ne possède pas de contraintes résiduelles.

Les budgets thermiques relatifs à toutes les étapes du procédé sont représentés à la figure VI.15. Le procédé QUBiC comporte trois niveaux d'interconnexions métalliques (IN1, IN2 et IN3). Un niveau métallique est composé d'une couche d'adhésion de TiW et d'un film d'AlCu. Pour le premier niveau, le film de TiW sert également de barrière de diffusion entre l'aluminium et le silicium. Chaque niveau est isolé des autres par une structure multicouche d'isolation électrique (CO1 et CO2), constituée de trois couches d'oxyde différentes:

- une couche d'oxyde non dopée (USG),
- une couche de silicate (SOG),
- une couche dopée à 4% en poids en phosphore (PSG).

En effet, dans les procédés comportant plusieurs niveaux de métallisation, on génère des topographies marquées. Elles créent par leur géométrie accidentée des problèmes liés par exemple à la faible couverture de marche des couches métalliques, ou encore à la création de trous (*voids*) lors du dépôt des couches diélectriques. C'est la raison pour laquelle il est nécessaire de planariser les couches d'interconnexions, en utilisant, comme c'est le cas ici, des matériaux dédiés à cette fonction (i.e., SOG). Cependant, l'oxyde SOG constitue un médiocre isolant électrique et sa porosité le rend peu fiable dans le temps. Il est nécessaire de l'encapsuler entre deux oxydes. Parmi ceux-ci, le dopage en phosphore de l'oxyde supérieur lui confère des qualités de piégeage des contaminants intrinsèques au SOG.

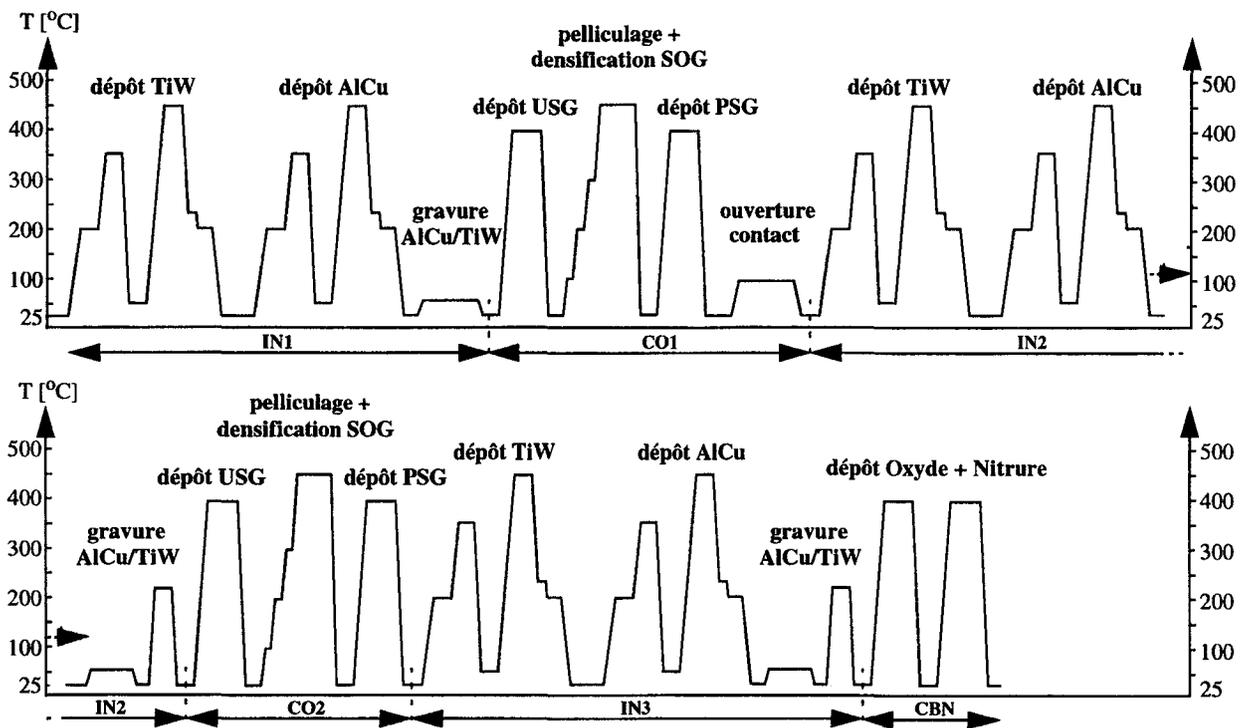


Figure VI.15: Description des principales étapes technologiques du procédé QUBiC.

Enfin, la couche de passivation (CBN) est la dernière couche déposée lors de la fabrication du circuit intégré. Cette couche doit préserver les circuits des influences électriques, chimiques et physiques de l'environnement extérieur. Elle est composée d'une couche d'oxyde déposé par PECVD recouverte d'une couche de nitrure PECVD.

Concernant le traitement de densification du silicate SOG, le budget thermique appliqué correspond à celui ayant servi à sa caractérisation, et donc à la calibration du modèle de densification, que nous avons exposé au chapitre précédent.

VI.3.3 Résultats de simulation

Pour faire cette étude, il nous faut dans un premier temps définir une topographie spécifique de la structure d'interconnexion du procédé QUBiC. La photographie MEB de la figure VI.16.a représente l'édifice considéré: on peut identifier les trois niveaux de métallisation (IN1, IN2 et IN3), ainsi que les deux niveaux diélectriques (CO1 et CO2) composé chacun d'un empilement USG/SOG/PSG. Seule la couche de passivation n'apparaît pas directement. Sur la gauche de la coupe, on peut également remarquer la présence d'un contact entre les deux premiers niveaux d'interconnexions.

La topographie correspondant à cette structure obtenue par simulation est reporté à la figure VI.16.b. La simulation permet de reproduire fidèlement la topographie du circuit, ce qui constitue une première validation en vue d'obtenir une prédiction fiable des effets du relief sur la contrainte mécanique.

Concernant le calcul à proprement parlé, la simulation du procédé fait appel à un certain nombre de modèles de contraintes précédemment exposés et calibrés: contraintes thermiques (montées/descentes en température), intrinsèques (dépôt de film), et extrinsèques (densification du SOG). Les différents comportements rhéologiques sont également activés: élasticité pour le substrat de silicium et les films de TiW, viscoélasticité pour les oxydes et le nitrure, et élastoplasticité pour les alliages d'AlCu.

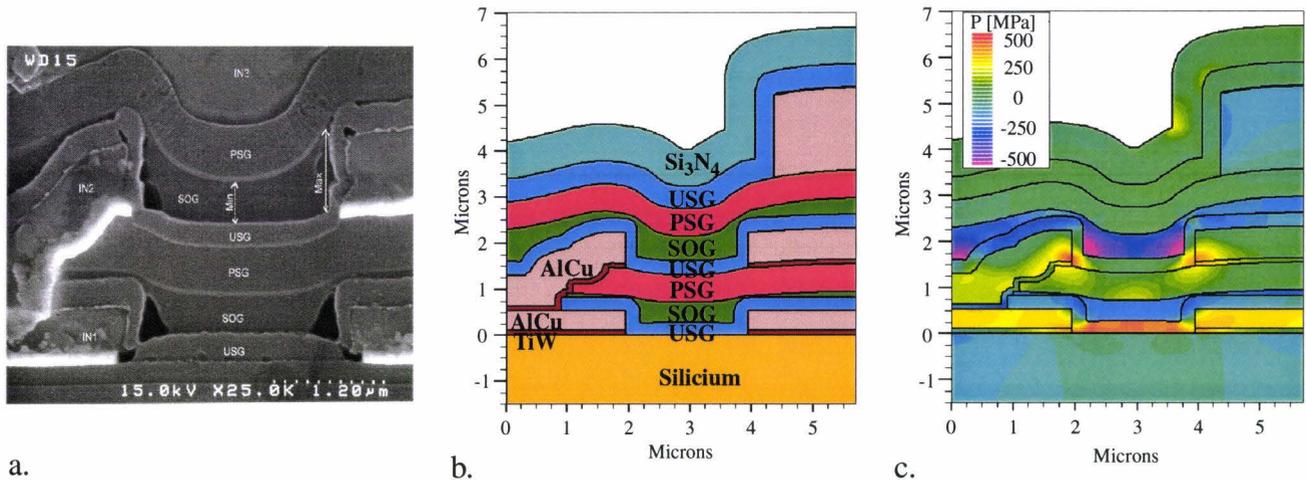


Figure VI.16: Photographie MEB de l'édifice d'interconnexions étudié (a); topographie simulée correspondante (b); champ de pression hydrostatique calculée (c).

Le champ de pression hydrostatique à la fin de la fabrication de l'édifice d'interconnexions est représenté à la figure VI.16.c. Grâce à ce résultat, on peut mettre en évidence l'existence de zones fortement contraintes localement, notamment aux singularités topographiques. Les zones de plus fortes contraintes se situent au second niveau d'interconnexions. On remarque ainsi que les contraintes du SOG de ce niveau sont en tension et qu'elles sont très sensiblement supérieures à celles présentes dans le SOG du premier niveau. Comme on le verra par la suite, la tension induite dans ce matériau provient de la contraction importante lors de sa densification. Le film de SOG du second niveau étant plus épais et la couverture de marche plus difficile à planariser qu'au premier niveau, les niveaux de contraintes en sont d'autant plus élevés. Cette remarque est à mettre en parallèle avec l'observation que seuls des craquements au second niveau ont été décelés.

VI.3.4 Optimisation de la densification du SOG

VI.3.4.1 Calcul des contraintes induites par la densification

Nous nous focalisons à présent sur la réalisation du film de SOG du second niveau d'isolation diélectrique (CO₂), qui est celui présentant un risque de fissuration.

Comme nous avons déjà pu le mentionner au moment de la calibration du modèle de densification pour ce matériau, le pelliculage du film à l'état liquide n'est pas modélisé à proprement parlé et le processus initial d'évaporation des solvants lors de ce pelliculage n'est pas pris en compte. Dans notre approche, la topographie du film de SOG après le pelliculage est reproduite par un dépôt ordinaire suivi d'une étape de fluage du matériau en considérant une viscosité très faible ($\sim 10^{10}$ Poises) caractérisant son état quasi-liquide. La topographie ainsi

obtenue est illustrée à la figure VI.17.a. Ensuite, les différents traitements thermiques d'évacuation des solvants et de densification sont effectués. Comme cela avait déjà été constaté pour des films de SOG déposés sur des substrats plans (cf. §V.1.2.2), la densification réduit de 25% l'épaisseur du film. La variation absolue est donc d'autant plus marquée que l'épaisseur initiale du film est grande.

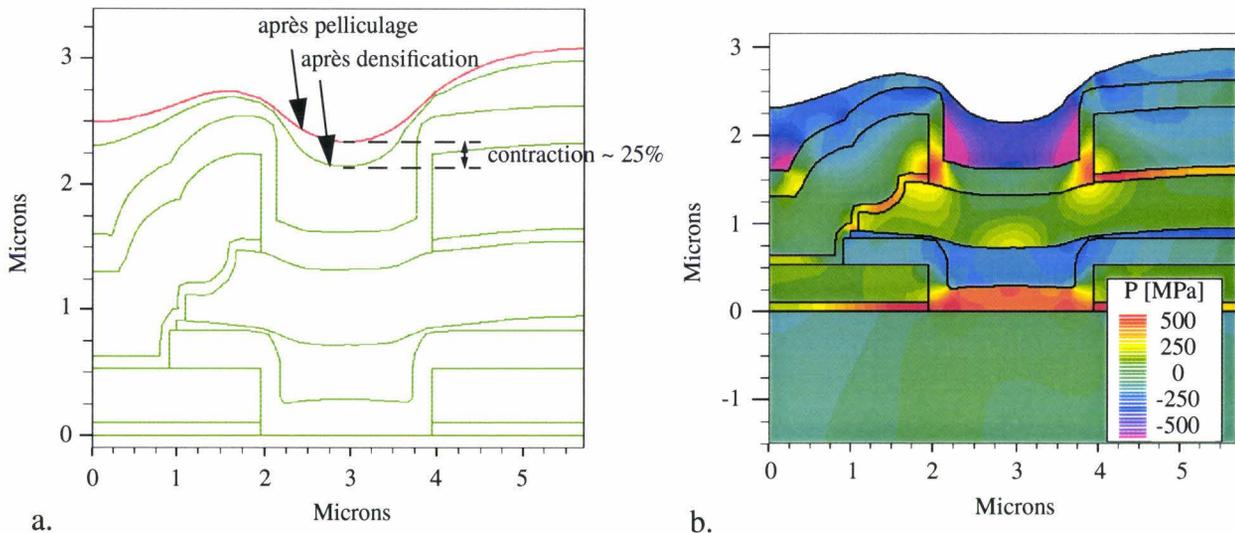


Figure VI.17: Contraction du SOG du second niveau induit par densification (a); champ de pression hydrostatique après densification (b).

La figure VI.17.b représente le champ de pression hydrostatique calculé après la densification du SOG. On remarque que la tension induite par la contraction du film est particulièrement marquée aux “marches” de la topographie. En effet, l'épaisseur initiale du film reste très grande dans cette région, mais de par l'adhésion du film à l'oxyde CVD sous-jacent, le SOG ne peut se contracter aussi aisément qu'au milieu de l'ouverture.

Les niveaux de contraintes en tension générés sont très importants ($>500\text{MPa}$). De telles contraintes peuvent provoquer des craquements de film comme ceux observés en production. Cependant, les fissures ne sont décelées qu'après le dépôt du film de PSG (et non pas pendant la densification). On en conclut donc que cette étape ajoute une contribution supplémentaire aux efforts internes de l'édifice, et que cette contribution est suffisante pour dépasser la limite de rupture du SOG.

La figure VI.18 illustre schématiquement l'évolution des efforts internes du SOG lors du processus de dépôt du film de PSG. Lors de la formation de cet oxyde, le SOG subit dans un premier temps une dilatation thermique lors du chauffage permettant d'atteindre la température de dépôt (400°C). Lors du processus de dépôt, la contrainte intrinsèque du PSG modifie par réaction celle du SOG. Néanmoins, nous verrons par la suite que cet effet est négligeable. Lors de la descente en température, comme le coefficient de dilatation thermique du SOG ($\alpha_{\text{SOG}}=1.0 \times 10^{-6} / ^\circ\text{K}$) est plus important que celui du PSG ($\alpha_{\text{PSG}}=0.5 \times 10^{-6} / ^\circ\text{K}$), la contraction thermique du SOG pour revenir à sa configuration initiale se trouve “contrainte” par la présence du PSG (i.e., il n'y a plus de surface libre). De ce fait, la tension résiduelle du film de SOG se trouve renforcée. Nous analysons de manière plus quantitative ces mécanismes au paragraphe VI.3.4.2.

On a reporté à la figure VI.19 à la fois le champ de pression hydrostatique obtenu après dépôt du PSG et une photographie MEB mettant en évidence l'apparition de fissurations. On vérifie de cette manière que ces fissurations correspondent bien à une relaxation de contraintes en tension excessives, étant donné qu'elles prennent naissance à l'interface SOG/USG au niveau des marches topographiques et se propagent à travers les films de SOG et de PSG suivant un chemin bien particulier. Les régions de plus grandes contraintes en tension définissant les zones les plus fragiles, il est naturel de constater que ce chemin correspond à la ligne des plus fortes contraintes en tension.

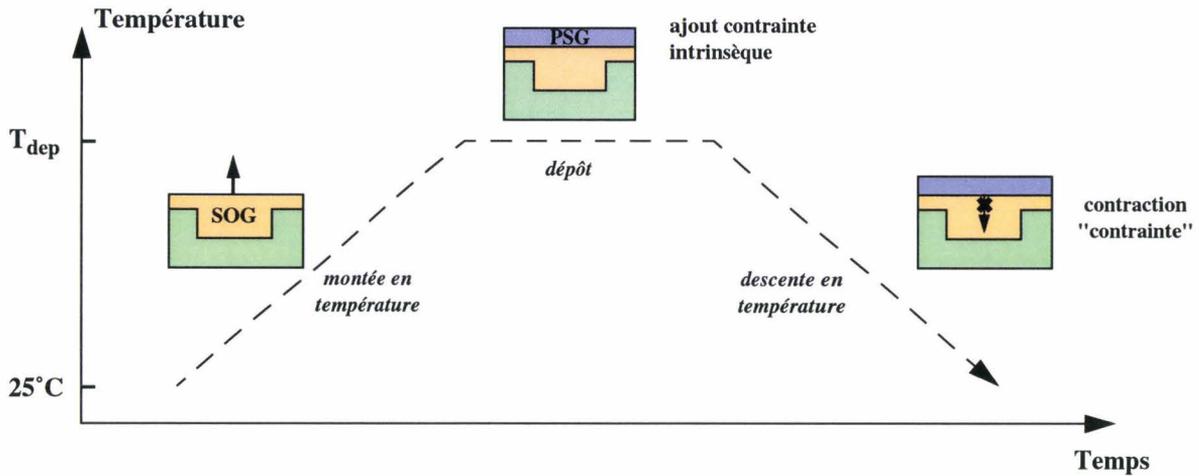
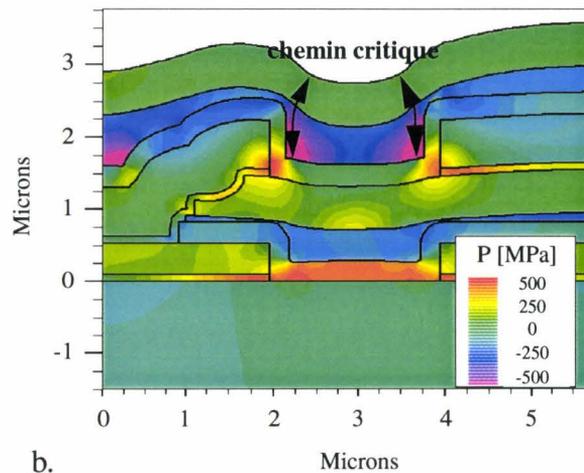


Figure VI.18: Explication qualitative des efforts engendrés dans le SOG lors de l'étape de dépôt du film de PSG.



a.



b.

Figure VI.19: Comparaison entre la localisation des craquements observés par photographie MEB (a) et le champ de pression hydrostatique après le dépôt du PSG (b).

Pour minimiser le risque d'apparition de ces fissurations, plusieurs paramètres technologiques peuvent être analysés. Nous avons choisi de nous intéresser à deux d'entre eux: la contrainte intrinsèque du PSG et le budget thermique de la densification du SOG.

VI.3.4.2 Influence de la contrainte intrinsèque du PSG

Les modifications des contraintes résiduelles du SOG induites par la contrainte intrinsèque du PSG sont à présent analysées. La valeur de cette contrainte intrinsèque obtenue par caractérisation est de: $\sigma_{int}^{PSG} = +80\text{MPa}$. Par ailleurs, la valeur de cette contrainte est très sensible aux paramètres du processus de dépôt et par conséquent on peut facilement ajuster sa valeur en les modifiant.

En considérant le principe de réaction, il est nécessaire d'avoir une contrainte intrinsèque en tension pour le PSG si l'on souhaite diminuer la contrainte résiduelle en tension du SOG. Pour vérifier cette explication, la valeur moyenne de la contrainte normale (σ_{xx}) du SOG est calculée pour différentes valeurs de contrainte intrinsèque du PSG. Les résultats sont reportés au tableau VI.2. La valeur de la contrainte initiale du SOG (i.e.: avant le dépôt du PSG) est de 427 MPa.

Comme prévu, on note que l'état de tension du SOG est réduit lorsque la contrainte intrinsèque du PSG passe d'une valeur compressive (i.e.: négative) à une valeur en tension (i.e.: positive). Pourtant, même des variations importantes de cette contrainte intrinsèque n'induisent que de faibles modifications de la contrainte du SOG.

On remarque que la tension du SOG augmente légèrement après dépôt du PSG, pour le cas standard, alors que la contrainte intrinsèque du PSG est en tension (+80MPa). On s'attendrait au contraire à obtenir une diminution de la tension du SOG. La raison invoquée pour expliquer cet effet est la contraction "contrainte" du SOG durant la descente en température qui suit le dépôt du PSG, comme cela a été expliqué auparavant.

Tableau VI.2: Contrainte moyenne du SOG en fonction de la contrainte intrinsèque du PSG.

σ_{int}^{PSG} [MPa]	$\langle \sigma_{xx}^{SOG} \rangle$ [MPa]
-400	+444
-200	+439
0.	+434
+80*	+432
+200	+428
+400	+424

(* valeur standard)

En résumé, on peut conclure que l'ajustement de la contrainte intrinsèque du PSG ne permet pas d'obtenir une réduction importante des contraintes résiduelles du SOG, et donc de diminuer le risque de fissurations.

VI.3.4.3 Influence du budget thermique de la densification du SOG

Les premiers résultats relatifs à la densification du SOG nous ont révélé qu'elle représente une étape critique pour la formation de la couche diélectrique CO₂. Si l'on ne considère que l'aspect contraintes mécaniques, il semble très probable qu'une réduction de la température de densification et/ou de sa durée permette de réduire les contraintes dans la structure. Néanmoins, une réduction trop importante de ce budget thermique peut aboutir à une densification incomplète du film. Cela peut conduire à des dégradations mécaniques encore plus sévères comme l'ouverture des contacts, provoquée par un dégazage du SOG lors des étapes suivant sa densification [1].

L'objectif ici est d'obtenir une information quantitative quant à l'amplitude de la réduction des contraintes qu'engendrerait une modification des paramètres de densification (température et durée). Cette étude est menée en balayant un large spectre en température de densification [400°C - 500°C] et en durée [20 min. - 40 min.].

La figure VI.20.a représente la topographie du SOG obtenue pour trois températures de densification (400°C, 500°C et la valeur standard 450°C). Pour ces simulations, la durée du traitement thermique est fixée à sa valeur nominale (i.e.: 30 min.). On remarque qu'une variation de 50°C autour de la valeur nominale modifie de manière significative la contraction du film. Par ailleurs, une réduction de la température de densification peut nécessiter une augmentation de sa durée, afin d'obtenir un niveau de densification équivalent. Pour établir l'impact d'une modification de ces paramètres technologiques sur la contrainte du SOG, un plan d'expériences est réalisé. Les résultats sont représentés sous la forme d'isocontours à la figure VI.20.b. Le positionnement des lignes d'isovaleurs indique clairement que les deux paramètres ont des conséquences importantes sur le niveau de contraintes résiduelles du SOG. Naturellement, le minimum des contraintes est généré pour le plus faible budget thermique (i.e.: 20 min. @ 400°C).

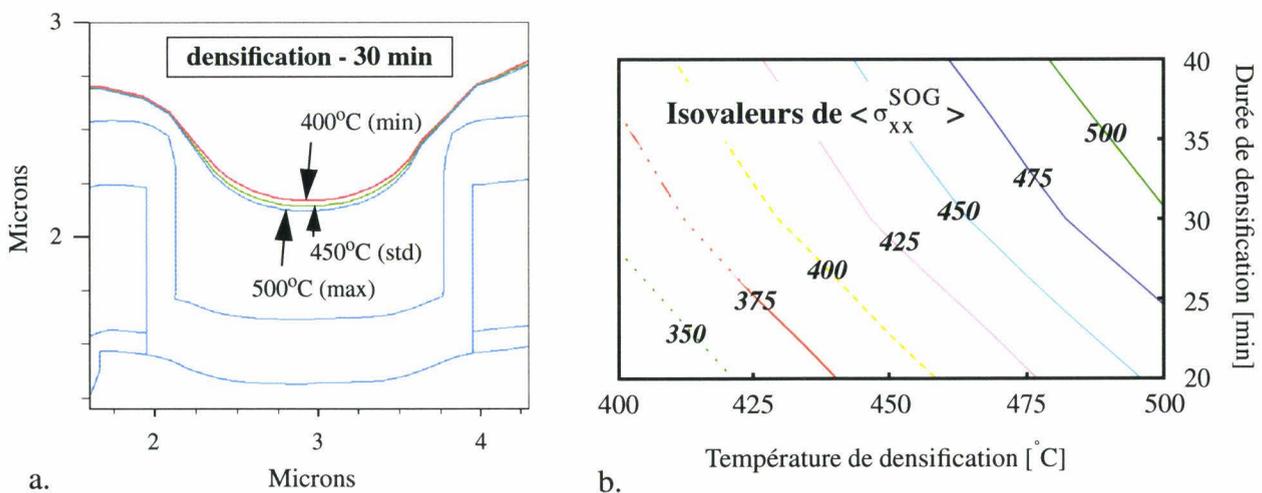


Figure VI.20: Contraction du SOG pour différentes températures de densification (a); isocontours des contraintes résiduelles du SOG en fonction de la température et de la durée de la densification (b).

En production, en réduisant de 20°C la température de densification (i.e.: 430°C) tout en conservant la même durée (30 min.), le problème de fissurations a complètement été résorbé. D'après l'abaque de la figure VI.20.b, cette modification réduit théoriquement le niveau de contraintes de 427MPa à environ 400MPa. Ce gain appréciable peut justifier partiellement l'annihilation des défaillances. Ceci étant, la réduction du budget thermique a été associée à un meilleur contrôle du taux d'hygrométrie lors de la densification (<30%). L'effet de ce paramètre n'étant pas pris en compte dans notre modèle, la question demeure quant à son impact sur l'amélioration observée de la fiabilité.

Les deux applications présentées nous ont permis d'illustrer l'apport des nouvelles fonctionnalités du simulateur IMPACT, en termes de modélisation mécanique, pour le contrôle et l'optimisation des procédés de fabrication des structures d'interconnexions.

Références Bibliographiques du Chapitre VI

- [1] **P. LEDUC**, *Etudes des Contraintes Mécaniques dans les Edifices d'Interconnexions d'un Procédé Submicronique*, Thèse de doctorat, USTL, 1999.
- [2] **J.-C. VALLÉE**, communications privées, PHILIPS Semiconducteurs, Caen, 1999.
- [3] **Y.-L. SHEN**, *Stresses, Deformation, and Void Nucleation in Locally Debonded Metal Interconnects*, J. Appl. Phys., **84**(10), pp. 5525-5530, 1998.
- [4] **M.A. KORHONEN**, *Mechanisms of Thermal Stress Relaxation and Stress-Induced Voiding in Narrow Aluminium-Based Metallizations*, J. Appl. Phys., **69**(12), pp. 8083-8091, 1991.

Chapitre VII : CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Dans ce travail de thèse, les principales sources de contraintes mécaniques rencontrées dans les procédés technologiques silicium ont été analysées et modélisées. Ces développements répondent au besoin croissant d'identification et de contrôle des efforts mécaniques dans les dispositifs pour limiter leurs défaillances. En effet, l'état de contrainte résiduel d'une couche possède plusieurs composantes élémentaires qu'il est indispensable d'extraire afin de pouvoir cibler l'optimisation du procédé.

Les différentes techniques de mesure de contraintes (déflexion de plaque, spectroscopie micro-Raman, rayons X,...) permettent de quantifier le niveau d'efforts internes des films et/ou du substrat, mais elles ne permettent pas de remonter directement à l'origine de ces contraintes. Le modèle de calcul des contraintes mécaniques que nous avons développé répond à cette attente. Il apporte une information locale de la contrainte, prend en compte les différentes sources possibles, et permet une optimisation rapide d'un procédé.

Sur la base existante de la modélisation de l'oxydation du silicium [1] et du calcul des contraintes d'origines élémentaires (contraintes thermiques et intrinsèques) [2], nous avons développé un ensemble de modèles permettant de compléter les sources de contraintes prises en compte dans la simulation, autorisant par la même le suivi de tout l'historique des contraintes, des étapes de fabrication des composants jusqu'à la réalisation des structures d'interconnexions. Par ailleurs, la modélisation de ces interconnexions constitue une évolution majeure de la simulation de procédés technologiques, qui restait jusqu'à présent cantonnée aux premières étapes de fabrication des composants. Cependant, cette extension nécessite la modélisation de nouveaux matériaux, et donc l'élaboration de nouvelles lois de comportements: c'est notamment le cas des alliages d'aluminium (AlCu et AlSiCu) pour lesquels un modèle d'élastoplasticité a été établi.

Concernant le travail de modélisation, l'accent a été porté sur les contraintes d'origine extrinsèque. Ainsi, les mécanismes d'absorption/évaporation d'eau dans les oxydes dopés ont pu être étudiés grâce à la modélisation des contraintes induites par ce phénomène, même si les niveaux restent relativement faibles dans ce cas (<100MPa). Par contre, celles engendrées par la densification des oxydes pelliculés comme le SOG peuvent atteindre des niveaux nettement

plus critiques ($>500\text{MPa}$), qui, accompagnés d'une contraction sévère du film ($\sim 25\%$), peuvent engendrer l'apparition de fissurations. Nous avons constaté au travers d'une application industrielle que le risque est critique pour la fiabilité des édifices d'interconnexions.

Parmi les contraintes de type extrinsèque, on s'est également intéressé au changement de phase comme la cristallisation du silicium amorphe. On a ainsi pu constater que ce phénomène pouvait provoquer des variations de contraintes extrêmement importantes ($\sim 1\text{GPa}$).

L'effet de niveaux élevés de dopage a également été modélisé. Les contraintes associées soient aux épitaxies, soient aux zones fortement dopées demeurent assez modestes ($<50\text{MPa}$). Toutefois, les conséquences peuvent être non-négligeables pour des applications très particulières, comme c'est le cas des poutres de silicium dont la courbure initiale est sensiblement affectée par les gradients de concentrations en impuretés ioniques.

A partir d'un modèle semblable à celui de l'oxydation, la croissance des siliciures de titane (TiSi_2) a été modélisée. Les contraintes engendrées par cette étape sont particulièrement élevées ($>1\text{GPa}$) et peuvent conduire très souvent à l'apparition de dislocations dans le substrat.

L'analyse précise des contraintes engendrées par l'oxydation du silicium a conduit à affiner le modèle en introduisant notamment l'expansion latérale de la silice en croissance, ce qui permet d'expliquer la courbure des substrats lors d'oxydations planes.

Enfin, la modélisation du comportement de l'élastoplasticité a permis une modélisation réaliste du comportement complexe de certains matériaux en température, comme les alliages d'aluminium. L'application au silicium du modèle d'élastoplasticité a également été validée grâce à la localisation des dislocations générées.

Tous ces modèles ont été implantés dans le simulateur bidimensionnel de technologies, IMPACT-4 [3].

De part la compacité des structures d'isolation, les effets tridimensionnels qui apparaissent lors de leur réalisation ne peuvent plus être négligés. Pour ce faire, un module de calcul 3D, DIFOX, a été développé [4]. Nous avons plus particulièrement adapté dans ce module le modèle non-linéaire viscoélastique d'oxydation telle qu'il existait déjà en 2D. Néanmoins, les difficultés inhérentes au calcul par éléments finis en 3D nous ont amené à élaborer certaines stratégies (ex: réduction du temps de calcul par découplage de la résolution du problème mécanique).

Que ce soit pour les développements bi- ou tri-dimensionnels, une calibration systématique a été menée en utilisant différentes techniques expérimentales: les microscopies MEB et MET pour obtenir les topographies des structures étudiées, la mesure de déflexion de plaque pour connaître les contraintes moyennes des films minces, et la spectroscopie micro-Raman pour mesurer localement les niveaux de contraintes dans le silicium.

Ce travail constitue une première étape dans l'étude des contraintes mécaniques des structures microélectroniques. Il nécessite d'être complété en intégrant l'effet des contraintes sur les caractéristiques intrinsèques des composants. En effet, il est reconnu maintenant que la diffusion des dopants est modifiée en présence de contraintes [5,6]. La réduction des dimensions requérant des profondeurs de jonction plus faibles, cet effet qui pouvait être considéré comme négligeable jusqu'à présent ne peut que s'amplifier.

Par ailleurs, les contraintes affectent directement les propriétés électriques des composants, en modulant par exemple la résistivité d'un milieu: c'est ce qu'on appelle l'effet piézorésistif [7]. Pour prendre en considération cet effet, une passerelle entre les résultats de calcul de contraintes des simulateurs de procédés et la modélisation de dispositifs devra être également envisagée.

Le travail relatif aux dislocations induites dans le silicium mériterait également d'être étendu. On a vu dans cette étude qu'une fois le champ de contraintes et la force critique nécessaire au déplacement des dislocations connus, il est possible de déterminer la position finale des dislocations. Cependant, l'enjeu principal est de prévenir l'apparition de ces dislocations. Il serait donc plus intéressant de pouvoir décrire les phénomènes dynamiques qui sont à l'origine de l'apparition de dislocations dans des situations réelles.

Parmi les hypothèses formulées, nous avons admis qu'il n'y avait pas de gradients thermiques au sein des matériaux. Ceci étant, des distributions non-uniformes de température existent toujours (notamment lors des entrées et sorties des fours de recuit), et les contraintes mécaniques qui en résultent peuvent conduire à l'apparition de dislocations aux bords des plaques [8]. Ce phénomène est directement proportionnel à la taille des plaques et constitue actuellement un problème sérieux pour le passage à des diamètres de 300mm [9].

Enfin, on a pu clairement démontré au cours de ce travail la nécessité d'aborder certains problèmes par une analyse tridimensionnelle des contraintes (ex: apparition de cloques sur un procédé industriel où la géométrie des lignes joue un rôle prépondérant). Néanmoins, certaines limitations numériques demeurent pour permettre la simulation 3D de structures aussi complexes que celles supportées en 2D. Ces limitations se concentrent autour des problèmes de traitement du maillage élément finis. Les efforts actuellement menés pour remédier à ce problème devrait permettre, à court terme, l'utilisation de plus en plus extensive d'outils de simulation 3D de procédés technologiques [10].

Références Bibliographiques du Chapitre VII

- [1] **V. SENEZ**, *Modélisation Bidimensionnelle de l'Oxydation du Silicium: Analyse Viscoélastique de la Relaxation des Contraintes*, Thèse de doctorat, USTL, 1995.
- [2] **P. FERREIRA**, *Introduction du Calcul Mécanique Généralisé dans la Simulation Bidimensionnelle de Procédés Technologiques Silicium*, Thèse de doctorat, USTL, 1999.
- [3] **B. BACCUS, D. COLLARD, P. FERREIRA, T. HOFFMANN, E. LAMPIN, V. SENEZ et E. VANDENBOSSCHE**, *IMPACT 4.9: User's guide*, 1998.
- [4] **B. BACCUS, R. BOSSUT, S. BOZEK, J. HERBAUX, T. HOFFMANN et V. SENEZ**, *DIFOX v.2.4: User's Guide*, 1999.
- [5] **K. OSADA, Y. ZAITSU, S. MATSUMOTO et T. ABE**, *Effect of Stress in the Deposited Silicon Nitride Films on Boron Diffusion of Silicon*, J. Electrochem. Soc., **142**(1), pp. 202-205, 1995.
- [6] **H. PARK, K.S. JONES, J.A. SLINKMAN et M.E. LAW**, *Effects of Hydrostatic Pressure on Dopant Diffusion in Silicon*, J. Appl. Phys., **78**(6), pp. 3664-3670, 1995.
- [7] **C. SMITH**, *Piezoresistance Effect in Germanium and Silicon*, Physical Review, **94**, pp. 42-49, 1954.
- [8] **S.M. HU**, *Stress-Related Problems in Silicon Technology*, J. Appl. Phys., **70**(6), pp. R53-80, 1991.
- [9] **T. FUKUDA et K.-I. HIKAZUTANI**, *The Analysis of Slip Extension and Induced Stress in 300 mm Diameter Wafers on Three-point Symmetrical Support*, Jpn. J. Appl. Phys., **39**(3A), pp. 999-1005, 2000.
- [10] **MAGIC_FEAT: Meshes and Global Integration for Semiconductor Front-End Simulation**, projet européen IST-1999-11433.

Annexe

Le dépôt d'un film sur un substrat conduit systématiquement à une courbure du système. La méthode de la mesure par déflexion de plaque (§III.2.2.1) s'appuie sur ce phénomène et permet l'évaluation de la contrainte résiduelle dans ce film.

La relation entre le rayon de courbure et la contrainte résiduelle dans un film mince déposé sur un substrat épais a été établie pour la première fois en 1909 par Stoney [1]. Sa démarche, que nous rappelons dans cette annexe, se fonde sur l'équilibre des forces et des moments au sein du film et du substrat.

La figure A.1 présente un film mince d'épaisseur t_f , de module d'Young E_f et de coefficient de Poisson ν_f , déposé sur un substrat d'épaisseur t_s et de caractéristiques élastiques E_s et ν_s . Sous l'effet des contraintes résiduelles, l'équilibre global du système se traduit par une répartition complexe d'actions et de réactions réciproques du film sur le substrat grâce à l'adhérence de l'interface. En élasticité, ces interactions se traduisent notamment par des gradients de contraintes très prononcés dans le plan de l'interface (contraintes tangentielles et contraintes latérales).

L'équilibre statique du système se traduit, sur une section plane perpendiculaire au plan du substrat, par la présence nécessaire d'efforts de cohésion auto-équilibrés, dans lesquels les contributions du film et du substrat doivent être distinguées. Pour les expliciter, on considère le modèle unidimensionnel simplifié d'un substrat en forme de poutre de largeur w (figure A.1).

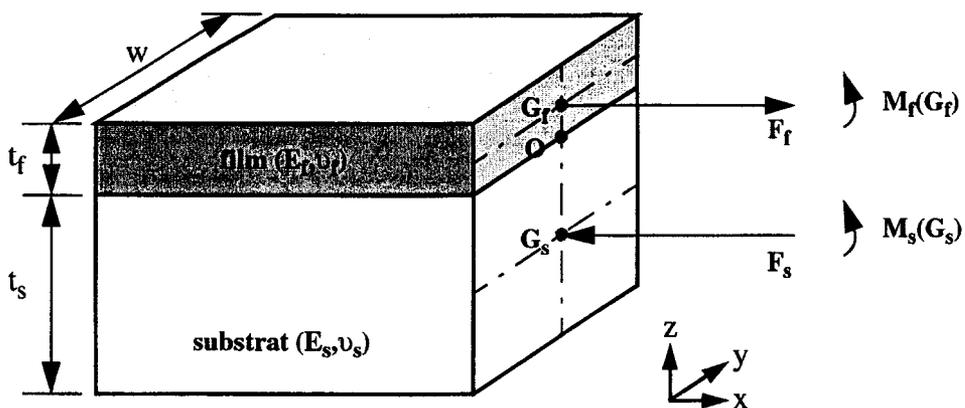


Figure A.1: Equilibre du système sous l'effet des efforts internes pour une poutre.

Dans une section droite de cette poutre, nous définissons les éléments de réduction des torseurs d'efforts de cohésion respectivement:

- i) dans le film: - force résultante: F_f
 - moment résultant en G_f : $M_f(G_f)$
- ii) dans le substrat: - force résultante: F_s
 - moment résultant en G_s : $M_s(G_s)$

Les forces F_f et F_s , inconnues, sont supposées agir uniformément sur les sections droites du film et du substrat, respectivement. Les moments, quant à eux, sont responsables d'une courbure du système bicouche. Les conditions d'équilibre global de la poutre en l'absence d'effort extérieur s'expriment sous la forme ci-dessous:

- i) nullité de la résultante générale dans l'ensemble de la section droite du système:

$$F_f + F_s = 0, \quad \text{d'où } F_f = -F_s \quad (\text{A.1})$$

- ii) nullité du moment résultant général calculé en O, point médian de la ligne interfaciale dans la section droite:

$$M_f(G_f) + M_s(G_s) + F_s \frac{t_s}{2} - F_f \frac{t_f}{2} = 0, \quad \text{d'où } (t_s + t_f)F_f = 2(M_f(G_f) + M_s(G_s)) \quad (\text{A.2})$$

Si l'on considère maintenant une poutre symétrique homogène (largeur w , épaisseur t), soumis à une flexion pure sous l'effet d'un moment M (figure A.2), la déformation par rotation des sections droites provient uniquement de la contraction ou de l'extension des fibres longitudinales. Elles subissent une tension sur la face convexe et une compression sur la face concave. Le système étant parfaitement symétrique, il existe un plan neutre correspondant au plan médian de la poutre. L'allongement d'une fibre quelconque est proportionnel à la distance de cette fibre à la surface neutre du système. Il en résulte que la déformation uniaxiale est fonction de la position z de la fibre par rapport à la fibre neutre et du rayon de courbure R :

$$\varepsilon(z) = \left[\frac{(R \pm z)\theta - R\theta}{R\theta} \right] = \pm \frac{z}{R} \quad (\text{A.3})$$

En élasticité, l'application de la loi de Hooke unidimensionnelle ($\sigma(z) = E \cdot \varepsilon(z)$) permet de calculer simplement le moment de flexion M au centre de symétrie [2]:

$$M = 2 \int_0^{t/2} (w \cdot \sigma(z) \cdot z) dz = \frac{Et^3 w}{12R} \quad (\text{A.4})$$

Ces résultats, obtenus dans le cas d'une poutre homogène, restent applicables aussi bien au substrat qu'au film précédemment considérés, et les deux peuvent être couplés grâce à l'équation (A.2).

De plus, dans le cas d'un système (film+substrat) en forme de plaque et non plus de poutre (i.e., modèle bidimensionnelle), la répartition des contraintes devient biaxiale, et la courbure est sphérique. Les mêmes formules s'appliquent à condition de remplacer le module d'Young E par le module biaxial $E/(1-\nu)$ [3]. Dans ce cas, le paramètre w désigne alors la largeur d'une bande

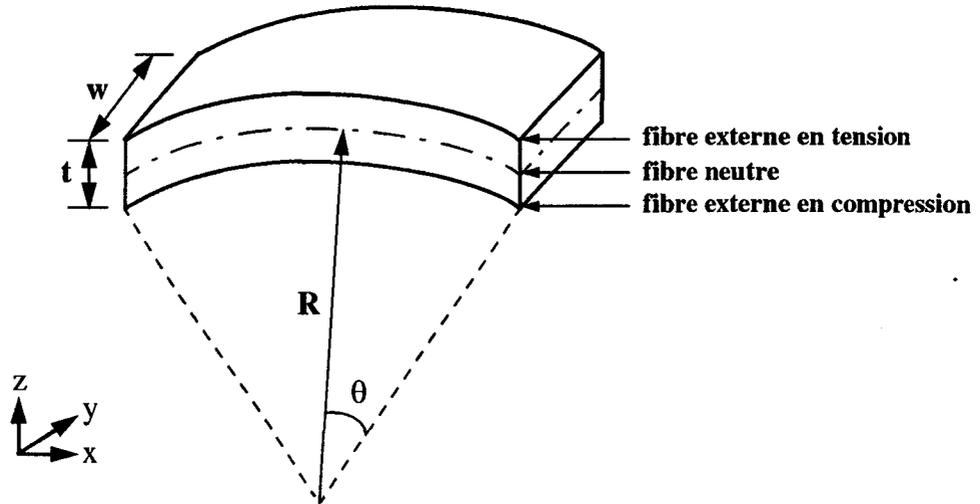


Figure A.2: Poutre symétrique en flexion pure.

découpée par la pensée dans le film. En considérant ces corrections et en remplaçant les moments du film et du substrat dans l'équation (A.2) par leurs expressions respectives (équation (A.4)), on obtient l'expression de la courbure:

$$\frac{1}{R} = \frac{6F_f \cdot (t_s + t_f)}{w \left[\frac{E_s}{(1-\nu_s)} t_s^3 + \frac{E_f}{(1-\nu_f)} t_f^3 \right]} \quad (\text{A.5})$$

Par ailleurs, la force résultante du film F_f est reliée à la contrainte par la relation:

$$F_f = 2 \int_0^{t_f/2} w \cdot \sigma_f(z) dz \quad (\text{A.6})$$

Or, dans la pratique, les films déposés ont généralement une épaisseur très inférieure à celle du substrat ($t_f/t_s \approx 10^{-3}$), ce qui permet de négliger le gradient de contraintes à travers l'épaisseur du film ($\sigma_f(z) \approx \text{cste} = \sigma_f^{(0)}$). La contrainte moyenne du film s'obtient alors en simplifiant et en combinant les équations (A.5) et (A.6):

$$\sigma_f^{(0)} = \frac{1}{6} \frac{E_s}{(1-\nu_s)} \frac{t_s^2}{t_f} \frac{1}{R} \quad (\text{A.7})$$

Cette formule constitue l'équation de Stoney.

Pour aboutir à cette équation, un certain nombre d'hypothèses sont formulées:

- i) le substrat est homogène, isotrope, et élastique, et le film est isotrope;
- ii) l'épaisseur du film est uniforme et demeure très inférieure à celle du substrat;
- iii) les dimensions transversales sont très grandes par rapport aux épaisseurs;
- iv) un état de contraintes planes (i.e., les composantes perpendiculaires au plan de l'interface sont identiquement nulles);
- v) les déformations et rotations sont infiniment petites.

Bien que la validité de ces hypothèses ait été vérifiée expérimentalement [4], l'extension de la formulation de Stoney à des configurations différentes reste d'intérêt (ex.: cas du dépôt d'un film sur un substrat mince, ou cas de grandes déformations). Freund a généralisé la formule de la courbure, utilisée dans l'expression de Stoney, avec un rapport arbitraire entre les épaisseurs et entre les modules biaxiaux du film et du substrat [5]. En fonction du désaccord de déformation produisant la courbure (ex.: déformation thermique due aux différences des coefficients de dilatation, ou désaccord de maille pour le cas d'une épitaxie), la courbure devient:

$$\frac{1}{R} = \frac{\Delta\varepsilon_m}{\frac{t_s}{2} \left[\frac{\left(1 + \frac{K_f I_f}{K_s I_s}\right) \left(1 + \frac{K_f t_f}{K_s t_s}\right)}{3 \frac{K_f t_f}{K_s t_s} \left(1 + \frac{t_f}{t_s}\right)} + \left(1 + \frac{t_f}{t_s}\right) \right]} \quad (\text{A.8})$$

où $\Delta\varepsilon_m$ représente le désaccord en déformation (ex.: $\Delta\varepsilon_m = \Delta\alpha\Delta T$ pour un problème thermique); K_f et I_f d'une part, et K_s et I_s d'autre part, représentent les modules biaxiaux et les moments d'inertie du film et du substrat, respectivement. Leurs formulations génériques s'écrivent [6]:

$$K = \frac{E}{(1-\nu)}, \quad \text{et} \quad I = \frac{wt^3}{12} \quad (\text{A.9})$$

Il est alors possible d'écrire explicitement les gradients linéaires de contraintes biaxiales du film et du substrat en fonction de la courbure donnée à l'équation (A.8) et de la position z [6]:

$$\sigma_f(z) = K_f \left[\left(z - t_s - \frac{t_f}{2} \right) - \frac{t_s \left(1 + \frac{K_f t_f}{K_s t_s} \right)}{6 \frac{K_f t_f}{K_s t_s} \left(1 + \frac{t_f}{t_s} \right)} \right] \frac{1}{R} \quad (\text{A.10})$$

$$\sigma_s(z) = K_s \left[\left(z - \frac{t_s}{2} \right) - \frac{t_s \left(1 + \frac{K_f t_f}{K_s t_s} \right)}{6 \left(1 + \frac{t_f}{t_s} \right)} \right] \frac{1}{R} \quad (\text{A.11})$$

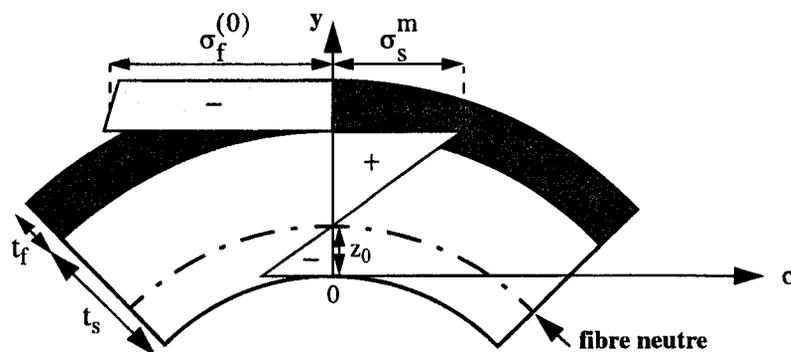


Figure A.3: Distribution des contraintes dans le cas d'un film épais.

Si l'on se replace dans le cas courant où $t_f \ll t_s$, on peut déterminer la position de la fibre neutre z_0 et la contrainte maximale dans le substrat σ_s^m :

$$z_0 \approx \frac{t_s}{3} \quad (\text{A.12})$$

$$\sigma_s^m \approx -4 \frac{t_f}{t_s} \sigma_f^{(0)} \quad (\text{A.13})$$

La figure A.3 représente de manière simplifiée les gradients de contraintes du système (substrat+film) et localise la position de la fibre neutre.

Evaluons de manière quantitative la plage d'applications de la formule de Stoney. En comparant les résultats obtenus, pour une déformation donnée, entre la formule simplifiée (équation (A.5)) et la formule générale (équation (A.6)), l'erreur commise par Stoney peut atteindre 30% si $t_f/t_s = 1/10$.

Si on se fixe une tolérance de 10% d'erreur, le rapport t_f/t_s ne doit pas dépasser environ 1/25.

Extrapolation de la déflexion à partir d'un domaine de simulation réduit

Certaines techniques de mesure de contraintes se basent sur la déflexion de plaque produite par un système (substrat+film). Comme le montre la figure A.4, il est possible d'établir une relation simple reliant la déflexion h du système au rayon de courbure R et au diamètre D de la plaque non-déformée:

$$h = R \left[1 - \cos\left(\frac{D}{2R}\right) \right] \quad (\text{A.14})$$

Dans la pratique, le diamètre de la plaque est toujours bien inférieur au rayon de courbure, et l'on peut simplifier l'équation (A.14), qui devient [7]:

$$\frac{1}{R} \cong \frac{8h}{D^2} \quad (\text{A.15})$$

La contrainte du film s'obtient alors grâce à la formule de Stoney (équation (A.7)).

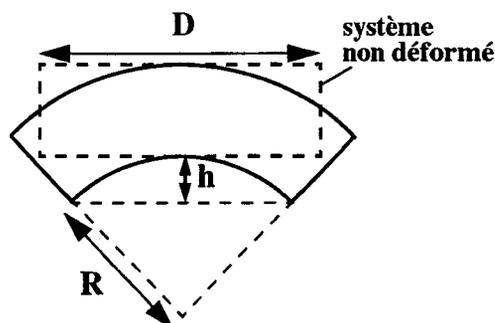


Figure A.4: Relation courbure-déflexion d'un système (film+substrat).

Par ailleurs, la précision des résultats de simulation obtenus par éléments finis est intrinsèquement liée à la discrétisation spatiale du domaine étudié. Même avec des techniques de raffinements locaux, le maillage d'une structure complète "réelle" (ex: dépôt d'un film mince sur un substrat de silicium de 200mm de diamètre) peut nécessiter un nombre prohibitif de nœuds.

Dans de nombreux cas (ex: épitaxie, caractérisation de films), la structure étudiée est parfaitement plane. Il est donc judicieux d'exploiter cette configuration particulière pour réduire le domaine de simulation, tout en gardant la possibilité d'extrapoler les résultats à la structure complète.

Considérons le cas d'un film mince d'épaisseur t_f déposé uniformément sur un substrat de diamètre D et d'épaisseur t_s (figure A.5.a). Le système est supposé en équilibre sous contraintes et induit une déflexion h avec un rayon de courbure R . La symétrie du système nous autorise à limiter l'étude à une demi-structure, en appliquant des conditions aux limites adéquates (figure A.5.b).

Il est également possible de réduire la largeur du domaine simulé tant que le diamètre considéré reste petit par rapport au rayon de courbure (i.e., limitation des effets de bords). La contrainte du film étant supposée homogène, le moment de flexion induit par le film, et donc la courbure, reste indépendant du diamètre (figure A.5.c). A partir de l'équation (A.15), on obtient la relation suivante entre déflexions et diamètres:

$$h = \left(\frac{D}{D'}\right)^2 \cdot h' \quad (\text{A.16})$$

Enfin, on peut encore réduire le domaine de simulation en considérant un substrat plus fin d'épaisseur t_s' (figure A.5.d). Cette fois-ci, le moment est affecté par cette épaisseur (cf. équation (A.4)).

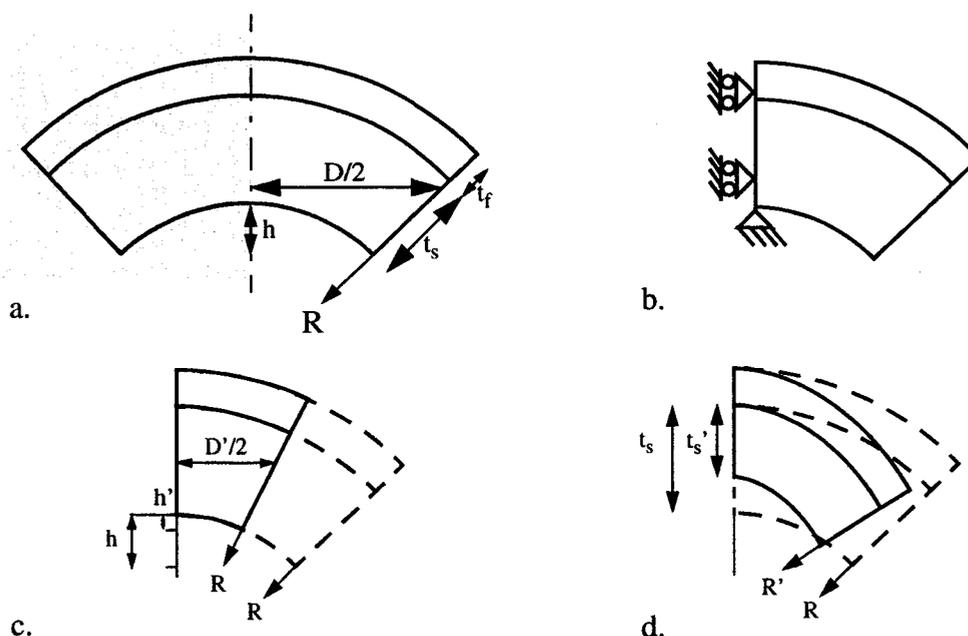


Figure A.5: Réduction du domaine de simulation; système (substrat+film) complet (a); demi-structure (b); réduction de la largeur de la structure (c); réduction de l'épaisseur du substrat simulé (d).

Si l'épaisseur du substrat du domaine de simulation reste suffisamment grande devant l'épaisseur du film ($t_s' \gg t_f$), la contrainte du film reste constante et est donnée par l'équation simplifiée de Stoney (équation (A.7)). Prenons un exemple pour valider cette hypothèse. On considère le système composé d'un film d'oxyde ($t_f = 0.5\mu\text{m}$) déposé sur un substrat épais ($t_s = 100\mu\text{m}$). La contrainte du film mince est de 670MPa en tension (i.e., courbure du substrat convexe en face arrière). La largeur du domaine de simulation est de $D'/2 = 50\mu\text{m}$ ($\gg h$). L'évolution de la courbure du système en fonction de l'épaisseur du substrat considéré pour la simulation (t_s') est représentée à la figure A.6. Cette courbure est calculée à partir de la déflexion h' grâce à l'équation (A.15). On constate que les mesures suivent la pente donnée par l'équation de Stoney tant que le rapport (t_s'/t_f) reste grand: la contrainte du film est donc constante dans ce cas.

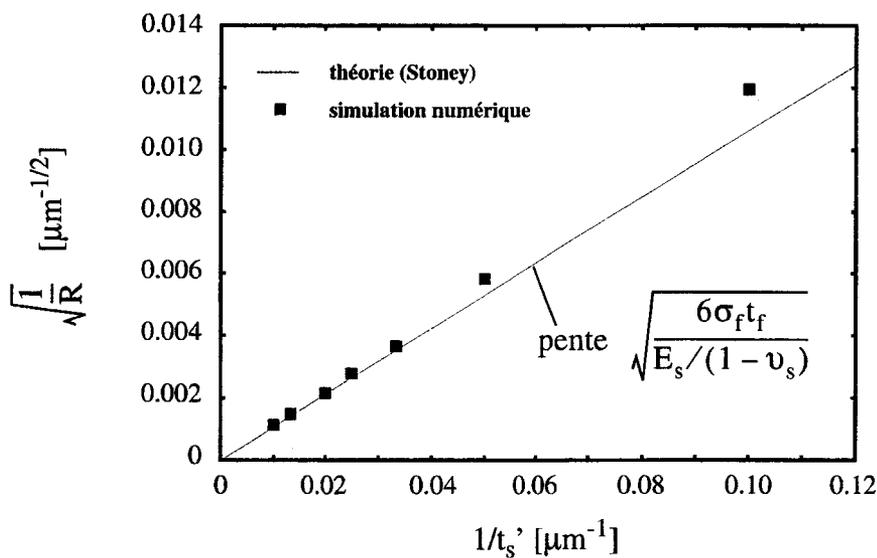


Figure A.6: Courbure d'un système (film+substrat) en fonction de l'épaisseur du substrat considéré.

Dans la gamme d'épaisseur t_s' où la formule de Stoney reste valable, on peut combiner les équations (A.7) et (A.15) pour obtenir la relation entre déflexions et épaisseurs:

$$h = \left(\frac{t_s'}{t_s}\right)^2 \cdot h' \quad (\text{A.17})$$

Dans le cas le plus général où l'on souhaite restreindre le domaine de simulation à la fois en épaisseur et en largeur, la double correction peut être utilisée pour extrapoler la déflexion simulée h' :

$$h = \left(\frac{t_s'}{t_s}\right)^2 \cdot \left(\frac{D'}{D}\right)^2 \cdot h' \quad (\text{A.18})$$

Références Bibliographiques de l'Annexe

- [1] **G.G. STONEY**, *The Tension of Metallic Films Deposited by Electrolysis*, Proc. Roy. Soc., London, **82**, p. 172, 1909.
- [2] **S. TIMOSHENKO** et **J.N. GOODIER**, *Theory of Elasticity*, 3rd Ed., McGraw-Hill Ed., 1970.
- [3] **R.W. HOFFMAN**, *Physics of Thin Film*, **3**, G. Hass and R.E. Thun Editors, Academic Press, New York, 1966.
- [4] **P. LEDUC**, *Etudes des Contraintes Mécaniques dans les Edifices d'Interconnexions d'un Procédé Submicronique*, Thèse de doctorat, USTL, 1999.
- [5] **L.B. FREUND**, **J.A. FLORO** et **E. CHASON**, *Extensions of the Stoney Formula for Substrate Curvature to Configurations with Thin Substrates or Large Deformations*, Appl. Phys. Lett., **74**(14), pp. 1987-1989, 1999.
- [6] **S.N.G. CHU**, *Elastic Bending of Semiconductor Wafer Revisited and Comments on Stoney's Equation*, J. Electrochem. Soc., **145**(10), pp. 3621-3627, 1998.
- [7] **B. LEROY**, *Instabilities in Silicon Devices*, Barbottin and Vapaille Ed., 1986.

LISTE DES FIGURES

Chapitre I. INTRODUCTION

Figure I.1: Vue schématique de l'environnement de simulation mis en place dans l'équipe TCAD de l'ISEN pour la conception de circuits sur silicium. Page: 7

Chapitre II. MÉCANIQUE DES MATÉRIAUX ET CALCUL DE STRUCTURES

Figure II.1: Corps continue et homogène soumis à des forces extérieures. Page: 11

Figure II.2: Définition des composantes du tenseur des contraintes. Page: 12

Figure II.3: Définition du champ des déplacements dans le plan (P_{xy}). Page: 14

Figure II.4: Bilan des forces internes et externes d'un corps élémentaire en équilibre. Page: 16

Figure II.5: Règles d'assemblages des éléments mécaniques dans le cas série (a), et dans le cas parallèle (b). Page: 18

Figure II.6: Modèle schématique uniaxial du comportement élastique linéaire. Page: 20

Figure II.7: Définition du coefficient de Poisson. Page: 20

Figure II.8: Modèle schématique uniaxial du comportement visqueux linéaire. Page: 22

Figure II.9: Modèle schématique uniaxial du comportement rigide plastique. Page: 22

Figure II.10: Eléments viscoélastiques; élément de Maxwell (a) et élément de Kelvin-Voigt (b). Page: 24

- Figure II.11:** Courbe de traction classique obtenue pour un matériau élastoplastique. Page: 26
- Figure II.12:** Surface limite élastique f d'un matériau élastoplastique. Page: 26
- Figure II.13:** Élément analogique de l'élastoplasticité (modèle de Saint-Venant). Page: 28
- Figure II.14:** Relaxation des contraintes pour des alliages d'aluminium. Page: 29
- Figure II.15:** Élément élastique parfaitement viscoplastique de Bingham-Norton. Page: 29
- Figure II.16:** Classification schématique des comportements rhéologiques. Page: 30
- Figure II.17:** Domaine 2D quelconque décomposé en éléments finis triangulaires. Page: 32
- Figure II.18:** Illustration des degrés de liberté mécaniques associés aux conditions aux limites "minimales". Page: 33
- Figure II.19:** Principales applications des conditions aux limites en 2D: CL "libres" (a), CL symétriques classiques (b), et CL symétriques modifiées (c). Page: 33
- Figure II.20:** Description de la demi-structure de test (encart: structure complète). Page: 34
- Figure II.21:** Contrainte normale σ_{xx} dans le silicium à $y=0.45\mu\text{m}$; demi-structure (a); comparaison pour différentes CL sur un motif de base (cf. figure II.20) (b). Page: 35
- Figure II.22:** Etapes permettant le maillage d'un domaine dans IMPACT-4. Page: 36
- Figure II.23:** Signification physique des hypothèses de déformations planes (a) et de contraintes planes (b). Page: 37

Chapitre III. SOURCES DE CONTRAINTES ET TECHNIQUES DE MESURE

- Figure III.1:** Evolution du coefficient de dilatation thermique du silicium en fonction de la température. Page: 45
- Figure III.2:** Etablissement des contraintes thermiques dans le film: a) Film décollé du substrat; b) Contraction du film par rapport au substrat; c) Application de force de traction F_{tr} au bord du film; d) Rassemblement du film sur le substrat; e) Suppression des forces appliquées: courbure du système. Page: 46
- Figure III.3:** Photographie MEB de structures d'isolation de type LOCOS. Page: 49
- Figure III.4:** Schématisation des étapes de fabrication de la technique SALICIDE. Page: 50
- Figure III.5:** Principe de la technique de mesure par déflexion de plaques. Page: 53
- Figure III.6:** Figures de diffraction CBED pour un échantillon en tension (A), neutre (B), et en compression (C). Page: 54
- Figure III.7:** Principe de la mesure des déformations par la diffraction des rayons X: variation de l'angle d'incidence et de la distance inter-réticulaire pour un matériau à l'état neutre (a) et déformé (b). Page: 55

- Figure III.8:** Protocole expérimentale de la mesure micro-Raman (a); spectre Raman du silicium non contraint (b). Page: 57
- Figure III.9:** Atténuation du signal Raman dans le substrat de silicium. Page: 59
- Figure III.10:** Discrétisation spatiale pour le calcul micro-Raman. Page: 62
- Figure III.11:** Comparaison des déviations de fréquence obtenues avec des lasers de longueurs d'onde différentes (cercles pleins: $\lambda=364$ nm; cercles vides: $\lambda=458$ nm). Les lignes correspondent aux résultats de simulation. Page: 64
- Figure III.12:** Simulation 3D d'une structure LOCOS réalisée à 900°C pendant 150 min. Définition du dessin de masque (layout) (a); Pression hydrostatique après oxydation (b); Champ de déviations de fréquence Raman correspondant (c). Page: 65

Chapitre IV. MODÉLISATION NUMÉRIQUE

- Figure IV.1:** Photo MEB du réseau de lignes (a), et motif étudiée (b). Page: 74
- Figure IV.2:** Comparaison des modèles analytiques et numériques avec les mesures micro-Raman; effet de la surgravure d'oxyde (a), comparaison complète (b). Page: 75
- Figure IV.3:** Algorithme du calcul mécanique complet (i.e., avec traitement des non-linéarités). Page: 77
- Figure IV.4:** Modèle analogique unidimensionnel complet de la viscoélasticité (a) et de l'élastoplasticité (b). Page: 79
- Figure IV.5:** Interprétation graphique du traitement de l'élastoplasticité. Page: 84
- Figure IV.6:** Traitement découplé de l'élastoplasticité et de la viscoélasticité. Page: 85
- Figure IV.7:** Evaluation de l'approche numérique incluant les deux algorithmes de traitement des non-linéarités. Page: 86
- Figure IV.8:** Structure des principaux oxydes de type SOG. Page: 92
- Figure IV.9:** Contraction locale du cristal de silicium induite par un atome de bore en site substitutionnel. Page: 95
- Figure IV.10:** Déformation hydrostatique en fonction de la concentration en bore. Page: 98
- Figure IV.11:** Modèle de croissance complet et incomplet de l'oxyde. Page: 99
- Figure IV.12:** Simulations 3D de la croissance d'un LOCOS (900°C, 90min) en utilisant la méthode complète (a), et la méthode mixte (b). Page: 102
- Figure IV.13:** Schématisation de la croissance de l'oxyde lors de sa croissance: croissance uniaxiale (a), croissance avec dilatation latérale (b). Page: 103
- Figure IV.14:** Modèle de croissance du TiSi_2 . Page: 107

Chapitre V. CALIBRATION ET VALIDATION

- Figure V.1:** Evolution des contraintes, en fonction du temps après dépôt et à température ambiante, pour des films d'oxydes CVD (USG, PSG et BPSG) (a); calibration des modèles analytique et numérique pour le film de BPSG (b). Page: 114
- Figure V.2:** Evolution des contraintes en température pour un film de BPSG après 500h de stockage (a), et un film de PSG après 1500h de stockage (b). Page: 116
- Figure V.3:** Influence de la densification sur l'absorption d'un film de BPSG; évolution de la contrainte du film après dépôt et après un stockage suivi de 3 cycles thermiques (a); expansion du film dans les deux cas (b). Page: 118
- Figure V.4:** Comparaison des spectres infrarouges d'un silicate (SOG) en fonction de la température maximale de densification; gamme [2700 - 4000 cm^{-1}] (a) et gamme [700 - 1400 cm^{-1}] (b). Page: 119
- Figure V.5:** Variation de l'épaisseur du film de SOG: lors des recuits de densification (a), à température ambiante à la suite de différents traitements thermiques (b). Page: 120
- Figure V.6:** Evolution des contraintes en température pour un film de TEOS après 2 mois de stockage: mesures (a); simulation (b). Page: 121
- Figure V.7:** Evolution des contraintes du film de TEOS lors de sa densification. Page: 122
- Figure V.8:** Evolution en température des contraintes dans des films de silicium amorphes et polycristallins (symboles: mesures de Miura; lignes: modèle). Page: 123
- Figure V.9:** Evolution des contraintes de l'oxyde lors de sa croissance à différentes températures en ambiance sèche O_2 (lignes: modèle; symboles: mesures) (a); évolution du gradient de contraintes dans l'oxyde pour une croissance à 950°C (b). Page: 125
- Figure V.10:** Calibration de la viscosité en température (a); Effet de l'expansion latérale sur la cinétique de croissance de l'oxyde à 800°C en ambiance sèche O_2 (b). Page: 126
- Figure V.11:** Procédure expérimentale de Park. Page: 127
- Figure V.12:** Vues du dessus (MEB) des structures LOCOS après gravure du nitrure et du piédestal d'oxyde pour des largeurs de masque de 0.7 μm et 0.45 μm . Page: 127
- Figure V.13:** Géométries 3D et coupes vues du dessus des structures de Park pour des largeurs de masque de 0.7 μm (a et a') et 0.4 μm (b et b'). Page: 128
- Figure V.14:** Evolution des longueurs de bec d'oiseau en fonction la largeur du masque de nitrure pour les structures de Park. Page: 129
- Figure V.15:** Comparaison des géométries simulées (2D et 3D) avec une photographie MET d'une structure LOCOS réalisée à 875°C - 360 min (H_2O). Page: 130
- Figure V.16:** Evolution des déviations Raman, simulées et mesurées, avant (a) et après (b) la

croissance de l'oxyde de champ. Page: 131

- Figure V.17:** Structure STI typique (simulation et photo MEB) (a); champ de pression hydrostatique à la fin de la réalisation du STI (b). Page: 132
- Figure V.18:** Comparaison entre les déviations Raman mesurées et simulées, après oxydation des flancs et après densification, pour trois longueurs L du mesa: $3\mu\text{m}$ (a), $2\mu\text{m}$ (b) et $1\mu\text{m}$ (c). Les résultats correspondent à un laser à 363.7nm . Page: 133
- Figure V.19:** Calibration du coefficient parabolique de la cinétique du TiSi_2 (a); évolution de l'épaisseur du TiSi_2 à différentes températures (b). Page: 134
- Figure V.20:** Photo MET de croissance de TiSi_2 en bord d'espaceur (a); champ de pression hydrostatique lors de la formation du TiSi_2 (b); effet des contraintes sur la cinétique de croissance (c). Page: 135
- Figure V.21:** Champ de contraintes (a, b et c) et profils de déviations Raman (a', b' et c') pour différents réseaux de lignes de TiSi_2 . Page: 137
- Figure V.22:** Déflexion du substrat en fonction de l'épaisseur d'épitaxie (expériences de Lin) (a); Déformation et concentration en bore de la structure avec un domaine de simulation réduit ($t_s' = 150\mu\text{m}$) pour une épitaxie de $10\mu\text{m}$. Page: 139
- Figure V.23:** Profils de déformation de la structure pour un épitaxie de $10\mu\text{m}$ en fonction de l'épaisseur du substrat considérée. Page: 139
- Figure V.24:** Déformation dans le film d'épitaxie en fonction de son dopage en bore (a), et en germanium (b). Page: 140
- Figure V.25:** Profils de dopage en bore pour les différents procédés de fabrication des poutres (a); géométrie typique d'une poutre simulée (b). Page: 141
- Figure V.26:** Influence de la longueur des poutres sur la courbure et la déflexion. Page: 142
- Figure V.27:** Déflexions des poutres en fonction de l'épaisseur d'oxyde résiduel. Page: 143
- Figure V.28:** Calibration du comportement élastoplastique des alliages d'aluminium-cuivre en fonction de l'épaisseur (symboles: mesures; ligne: modèle). Page: 146
- Figure V.29:** Calibration de l'élastoplasticité; comparaison des limites d'élasticité pour un alliage de $1.0\mu\text{m}$ d'épaisseur (a); limite d'élasticité en fonction de la température et de l'épaisseur(b). Page: 147
- Figure V.30:** Variations en température des contraintes de lignes d'AlCu pour différentes largeurs; mesures (a), résultats du modèle calibré (b). Page: 148
- Figure V.31:** Définition du motif élémentaire du réseau de lignes passivées (a); influence de la passivation sur les contraintes des lignes d'AlCu (b). Page: 149
- Figure V.32:** Evolution des contraintes des lignes d'AlCu passivées en fonction de leur rapport d'aspect en considérant la dépendance en épaisseur de la limite d'élasticité σ_Y (a), et en ne la considérant pas (b). Page: 150
- Figure V.33:** Variations en température de la contrainte d'un film de cuivre. Page: 151
- Figure V.34:** Croissance d'une isolation LOCOS en considérant un substrat élastique (a), ou élastoplastique (b); photographie de la structure (c). Page: 152
- Figure V.35:** Isolation LOCOS mettant en évidence l'apparition de dislocations (a); champ de contrainte RSS correspondante, calculée pour le plan de glissement (111), et en considérant un vecteur de Burger de $(a/2)[10\bar{1}]$ (b). Page: 153

Figure V.36: Abaque de Leroy (a); profil de la contrainte RSS à température ambiante et le long du plan (111) (b). Page: 154

Chapitre VI. APPLICATIONS

- Figure VI.1:** Motif du SUBILO mettant en évidence une cloque du film de TiW au niveau de la tête d'oiseau du LOCOS enterré. Page: 161
- Figure VI.2:** Motifs étudiés pour évaluer le risque d'apparition des cloques. Page: 161
- Figure VI.3:** Description des principales étapes du procédé SUBILO (NB: pour l'étape de siliciuration, seules les variations thermiques sont simulées). Page: 163
- Figure VI.4:** Contraintes normales (latérales (a) et verticales (b)) pour le motif 4. Page: 163
- Figure VI.5:** Interprétation des efforts intérieurs induits dans le motif 4. Page: 164
- Figure VI.6:** Contraintes normales (latérales (a) et verticales (b)) pour le motif 4 (Calcul juste après le dépôt du TiW). Page: 165
- Figure VI.7:** Champs de contraintes latérales (σ_{xx}) pour les quatre motifs. Page: 166
- Figure VI.8:** Champs de contraintes verticales (σ_{yy}) pour les quatre motifs. Page: 166
- Figure VI.9:** Contraintes latérales (σ_{xx}) pour trois contraintes intrinsèques du TiW. Page: 168
- Figure VI.10:** Contraintes latérales (σ_{yy}) pour trois contraintes intrinsèques du TiW. Page: 168
- Figure VI.11:** Contraintes normales (σ_{xx} et σ_{yy}) pour une coupe 1D en $x = 2.5\mu\text{m}$. Page: 169
- Figure VI.12:** Contraintes normales (latérales (a) et verticales (b)) pour le motif 4. Le film de TiW est stratifié en 4 couches élémentaires. Page: 170
- Figure VI.13:** Contraintes normales (σ_{xx} et σ_{yy}) pour une coupe 1D en $x = 2.5\mu\text{m}$. Le film de TiW est stratifié en 4 couches élémentaires. Page: 170
- Figure VI.14:** Photographie MEB du défaut qui prend naissance dans la couche de SOG et débouche dans le film de PSG. Page: 172
- Figure VI.15:** Description des principales étapes technologiques du procédé QUBiC. Page: 173
- Figure VI.16:** Photographie MEB de l'édifice d'interconnexions étudié (a); topographie simulée correspondante (b); champ de pression hydrostatique calculée (c). Page: 175
- Figure VI.17:** Contraction du SOG du second niveau induit par densification (a); champ de pression hydrostatique après densification (b). Page: 175
- Figure VI.18:** Explication qualitative des efforts engendrés dans le SOG lors de l'étape de dépôt du film de PSG. Page: 176
- Figure VI.19:** Comparaison entre la localisation des craquements observés par photographie MEB (a) et le champ de pression hydrostatique après le dépôt du PSG (b). Page:

176

Figure VI.20: Contraction du SOG pour différentes températures de densification (a); isocontours des contraintes résiduelles du SOG en fonction de la température et de la durée de la densification (b). Page: 178



ANNEXE

Figure A.1: Equilibre du système sous l'effet des efforts internes pour une poutre. Page: 185

Figure A.2: Poutre symétrique en flexion pure. Page: 187

Figure A.3: Distribution des contraintes dans le cas d'un film épais. Page: 188

Figure A.4: Relation courbure-déflexion d'un système (film+substrat). Page: 189

Figure A.5: Réduction du domaine de simulation; système (substrat+film) complet (a); demi-structure (b); réduction de la largeur de la structure (c); réduction de l'épaisseur du substrat simulé (d). Page: 190

Figure A.6: Courbure d'un système (film+substrat) en fonction de l'épaisseur du substrat considéré. Page: 191

LISTE DES TABLEAUX

Chapitre III. SOURCES DE CONTRAINTES ET TECHNIQUES DE MESURE

- Tableau III.1: Coefficient de dilatation thermique de quelques matériaux en microélectronique. Page: 44
- Tableau III.2: Propriétés mécaniques des principaux matériaux utilisés en microélectronique. Page: 51
- Tableau III.3: Propriétés des principaux laser d'Argon utilisés en micro-Raman. Page: 60

Chapitre IV. MODÉLISATION NUMÉRIQUE

- Tableau IV.1: Composition du SOG silicate P114A. Page: 92
- Tableau IV.2: Valeurs théoriques des coefficients d'expansion α des principaux dopants. Page: 95

Chapitre V. CALIBRATION ET VALIDATION

- Tableau V.1: Caractéristiques d'absorption de quelques oxydes CVD à température ambiante. Page: 115
- Tableau V.2: Caractéristiques d'évaporation de quelques oxydes CVD. Page: 117
- Tableau V.3: Calibration de la viscosité du silicium après cristallisation. Page: 124

-
- Tableau V.4: Déflexions calculées (h') et extrapolées (h) pour différentes longueurs de poutres (L'). Page: 142
- Tableau V.5: Déflexions mesurées et simulées suivant les expériences de Chu. Page: 144

Chapitre VI. APPLICATIONS

- Tableau VI.1: Caractéristiques des films minces des édifices d'interconnexions. Page: 160
- Tableau VI.2: Contrainte moyenne du SOG en fonction de la contrainte intrinsèque du PSG. Page: 177

