



HAL
open science

Contraintes locales induites par le procédé “ Shallow Trench Isolation ” : Diffraction X haute résolution et simulation par éléments finis

Michel Eberlein

► **To cite this version:**

Michel Eberlein. Contraintes locales induites par le procédé “ Shallow Trench Isolation ” : Diffraction X haute résolution et simulation par éléments finis. Matière Condensée [cond-mat]. UNIVERSITE Paul CEZANNE, 2008. Français. NNT: . tel-00419896

HAL Id: tel-00419896

<https://theses.hal.science/tel-00419896>

Submitted on 25 Sep 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**Contraintes locales induites par le procédé
« Shallow Trench Isolation » :
Diffraction X haute résolution et
simulation par éléments finis**

THESE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE Paul CEZANNE

Discipline: Matériaux, Microélectronique et Nanosciences

Présentée et soutenue publiquement par

Michel EBERLEIN

le 24 Janvier 2008

Directeur de thèse : Prof. Olivier THOMAS

Ecole Doctorale : Physique et Sciences de la Matière

Membres du jury

Rapporteurs :	Alain Poncet	Professeur, INSA Lyon, Lyon
	Philippe Goudeau	Directeur de recherche CNRS, Université de Poitiers, Poitiers
Examineurs :	Roland Madar	Directeur de recherche CNRS, Directeur de l'ENSPG, Grenoble
	Stéphanie Escoubas	Maître de conférence, Université Paul Cézanne, Marseille
	Thierry Pedron	Directeur 'Technologies Avancées', Atmel Rousset, Rousset
Directeur de thèse:	Olivier Thomas	Professeur, Université Paul Cézanne, Marseille
Invités :	Pascal Rohr	Ingénieur, Atmel Rousset, Rousset
	Romain Coppard	Docteur-Ingénieur R&D, Sofileta-CEA, Grenoble

Cette thèse CIFRE est issue d'une collaboration entre le laboratoire TECSSEN UMR 6122 de l'Université Paul Cézanne à Marseille et la compagnie ATMEL à Rousset.

Je remercie Bernard Pichaud, directeur du laboratoire TECSSEN pour m'avoir accueilli au sein de son laboratoire durant toute la durée de la thèse. Les conditions de travail y étaient très agréables. Je remercie par la même occasion Rachid Bouchakour, directeur de IM2NP institut issu de la fusion du TECSSEN et du L2MP depuis janvier 2008.

Je remercie toutes les personnes qui ont encadré ce travail, à ATMEL et à l'Université, pour avoir cru en moi et m'avoir fait confiance tout au long de la thèse, en particulier Stéphanie Escoubas, maître de conférences au laboratoire, qui m'a beaucoup aidé a mes débuts et a suivi mon avancement au quotidien. Ma plus sincère reconnaissance va au professeur Olivier Thomas, responsable de l'équipe contraintes, pour avoir dirigé mes travaux de thèse et pour le savoir qu'il m'a transmis. J'associe à ces remerciements Romain Coppard et Pascal Rohr, respectivement de la société Sofileta et ATMEL, pour m'avoir introduit au milieu de la microélectronique et pour leurs conseils avisés dans ce domaine. Ma plus sincère reconnaissance à Thierry Pedron (directeur des technologies avancées au sein d'ATMEL) pour avoir pris du temps pour m'aider lors de la rédaction du manuscrit et avoir accepté de faire partie du jury.

Je remercie Philippe Goudeau et Alain Poncet pour avoir accepté de rapporter ces travaux de thèse ainsi que Roland Madard pour avoir présidé au jury de thèse.

Je remercie Marc Gailhanou, IR au laboratoire, pour sa disponibilité et ses conseils avisés en matière de diffraction et de programmation.

Merci à mon co-bureau et ami Cherif Benoudia pour les bons moments qu'on a passés et pour m'avoir supporté dans les bons moments et les moins bons.

Je remercie les autres membres du laboratoire (notamment les thésards) et d'ATMEL pour leur bonne humeur et leurs aides ponctuelles.

Merci à Jean Sébastien Micha, notre local contact sur la ligne BM 32 à l'ESRF qui aura rendu les séjours à Grenoble très agréables par son professionnalisme et son humour.

Merci à toute ma famille, mes parents, mes grand-parents, mon frère, Anne et aussi ma filleul Eloïse, même si la notion de thèse lui est encore étrangère.

Merci à mes amis d'ici et d'ailleurs qui m'ont soutenu pendant ces 3 années à Marseille, ils se reconnaîtront !

Merci à tous les autres que j'ai rencontré ces dernières années et qui ont joué un rôle dans ma vie professionnelle et personnelle...

SOMMAIRE

Introduction générale	9
------------------------------------	---

CHAPITRE I : Le procédé STI : Fabrication et contraintes mécaniques induites

Introduction	15
1. Procédé de fabrication	20
1.1 Les principales étapes.....	20
1.2 La fabrication des tranchées	23
1.2.1 STI Standard.....	23
1.2.2 Self Aligned-STI	24
1.2.3 Les variables du procédé	26
1.2.4 En conclusion	28
2. Mécanique des milieux continus	28
2.1 Déformations et contraintes	28
2.1.1 La loi de Hooke	29
2.1.2 Représentation matricielle de VOIGT.....	29
2.1.3 Système cubique.....	30
2.1.4 Les matériaux isotropes.....	31
2.1.5 Exemples de sollicitations particulières	33
2.2 Changement de repère	34
2.3 Contraintes thermo-élastiques et intrinsèques.....	36
2.4 Déformation plastique dans le silicium monocristallin.....	38
3. Les éléments finis pour l'analyse des déformations et des contraintes.....	40
3.1 Le logiciel FEMLAB	41
3.2 Simulation d'un réseau de lignes	42
3.3 Effet de bord dans un réseau de lignes.....	44
3.4 Effet de l'anisotropie du silicium sur les déformations.....	45
3.5 Comparaison d'un modèle composite aux simulations FEMLAB.....	46
3.6 Etude par éléments finis de l'influence des dimensions des tranchées STI sur les contraintes	50
3.7 Comparaison des profils de déformations FEMLAB et ISE.....	55
Conclusion.....	58
Références :	59

CHAPITRE II : Description des méthodes de détermination des déformations mécaniques locales

1. Méthodes Optiques.....	65
1.1 Raman / Micro Raman	65
1.2 Vers le ‘Nano- Raman’	69
2. Méthodes ‘électroniques’	69
2.1 La microscopie électronique à transmission	69
2.1.1 CBED	69
2.1.2 HR-TEM.....	71
2.2 EBSD.....	72
3. Méthodes de diffraction des rayons X.....	74
3.1 Diffraction de Kossel	74
3.2 Microdiffraction	75
3.2.1 Microdiffraction monochromatique	75
3.2.2 Microdiffraction en faisceau ‘blanc’	75
3.3 Diffraction haute-résolution sur un système périodique	76
3.4 Inversion directe	77
3.5 Diffraction Cohérente.....	78
Conclusion :.....	79

CHAPITRE III : La diffraction des rayons X en haute-résolution : Application à l’étude des déformations locales dans des réseaux STI

1. La diffraction de rayons X	85
1.1 Amplitude diffusée dans l’approximation cinématique:	85
1.2 Représentation de l’espace réciproque	87
1.3 Cas d’un système périodique.....	88
1.4 Cas d’un cristal déformé	91
1.4.1 Déformations homogènes.....	91
1.4.2 Déformations inhomogènes.....	92
1.5 Exemple de calcul d’intensité par transformée de Fourier.....	93
2. Mesures expérimentales	95
2.1 Acquisition des cartographies de l’espace réciproque	95
2.2 Montages expérimentaux	96
2.2.1 Mesures en laboratoire	96
2.2.2 Mesures en rayonnement synchrotron (ESRF BM 32)	101
2.2.3 Présentation et fonctionnement d’un synchrotron.....	103
2.2.4 Intérêt des mesures en rayonnement synchrotron	105
2.3 La préparation des échantillons.....	107
3. Simulation des cartographies de l’espace réciproque.....	110
3.1 Méthodologie	110

3.2 Calcul de l'intensité diffractée	111
4. Résultats expérimentaux :	113
4.1 Interprétation des cartographies de l'espace réciproque	113
4.2 Etude des profils de déformations	116
4.3 Répétabilité des mesures	118
5. Cartographies simulées et comparaison aux mesures HR-XRD	118
5.1. Choix de la profondeur de silicium à prendre en compte.....	118
5.2. Critère de comparaison des cartographies.....	119
5.3. Résultats	120
5.3.1. Ajustement à un paramètre.....	120
5.3.2. Ajustement à deux paramètres	121
5.3.3 Conclusion.....	125
Conclusion.....	127
References :	128

CHAPITRE IV : Etude par Diffraction X Haute-Résolution de l'influence des paramètres de fabrication sur les déformations et les contraintes générées par le procédé STI

1. Etude de deux procédés STI : comparaison SA-STI / STI Std	133
2. Etude des étapes individuelles du procédé SA-STI.....	142
3. Etude du matériau de remplissage des tranchées	145
3.1 TEOS/O ₃ pour des périodes de 580 nm	145
3.2 Mise en tension du silicium.....	147
3.2.1 Remplissage des tranchées avec l'oxyde TEOS/O ₃ de type HARP.....	147
3.2.2 Remplissage des tranchées avec W	149
4. Variations géométriques.....	151
4.1 Largeur des lignes (b).....	151
4.2 Profondeur des tranchées (h) et épaisseur du 'liner' (e).....	152
5. Variations de procédé.....	153
5.1 Orientation des lignes.....	153
5.2 Etude comparative de différents 'liners'	154
6. Mesures sur des structures plus complexes.....	157
6.1 Echantillons de période 580 nm (technologie 150 nm).....	157
6.2 Echantillons de période 200 nm (technologie 90 nm).....	160
Conclusion.....	162

Conclusions générales et perspectives	165
Publications et communications	169
ANNEXE 1	171
ANNEXE 2	175
ANNEXE 3	179

Introduction générale

Avec la continuelle diminution des dimensions critiques des composants de la microélectronique, les contraintes locales sont devenues une problématique incontournable. Cette problématique a fait l'objet de nombreux travaux de thèse, notamment [Rom06] et [Clé06]. En effet les contraintes affectent directement les propriétés des matériaux et donc les performances des dispositifs. Pendant longtemps, les contraintes ont été considérées comme un phénomène néfaste car elles peuvent générer des dislocations, qui provoquent généralement des courants de fuite. Lorsque les contraintes sont très élevées, elles peuvent également être responsables de délaminations, de fissurations ou même de l'apparition de cavités (phénomène de 'stress voiding') [Gal03]. Mais les contraintes savent aussi se montrer bénéfiques puisqu'elles améliorent sensiblement la mobilité des porteurs de charges, notamment dans le silicium [Wel94], ainsi que la rétention des données dans les mémoires non-volatiles [Arg07]. Dans ce contexte, la connaissance des contraintes à l'échelle la plus locale possible devient un enjeu de taille.

Afin d'augmenter la densité d'intégration des composants en microélectronique, de nombreuses applications telles que les mémoires non volatiles, se sont orientées vers le procédé d'isolation appelé STI ('Shallow Trench Isolation') [Faz93, Bry94]. Cette technique d'isolation consiste à graver des tranchées dans un substrat de silicium monocristallin par photolithographie puis à les remplir d'oxyde de silicium. Cela permet d'isoler physiquement et électriquement les composants (mémoires, transistors...) qui seront fabriqués dans les lignes de silicium non gravées, appelées régions actives. Les nombreuses étapes de ce procédé engendrent des contraintes mécaniques très importantes, qui avec la réduction de la taille des composants peuvent devenir critiques pour la fiabilité des dispositifs. L'objectif de ce travail de thèse a été d'évaluer les déformations et contraintes locales, c'est-à-dire à l'échelle submicronique, induites par le procédé STI.

Les structures étudiées se présentent sous la forme de réseaux de lignes de silicium séparées par les tranchées d'isolation. Elles ont été fabriquées dans le cadre de cette thèse CIFRE en collaboration avec le laboratoire TECSSEN par la société ATMEL-Rousset (projet EREVNA). Atmel Corporation est un leader industriel dans le design et la fabrication de semiconducteurs avancés et plus particulièrement de microcontrôleurs, de mémoires non-volatiles (NVM), de composants pour les radio-fréquences et de détecteurs. Les échantillons ont été conçus pour être représentatifs des mémoires de type EEPROM (Electrically Erasable and Programmable Read Only Memory) et Flash pour les noeuds technologiques 150 nm et 90 nm (tailles qui correspondent à la dimension latérale du canal pour un transistor).

Dans ce cas, les dimensions critiques des lignes de Si sont inférieures à 100 nm. A ces dimensions, il devient très difficile de réaliser des mesures de déformations avec une bonne résolution et de manière non destructive [Clé04]. Nous avons choisi la technique de diffraction de rayons X haute-résolution pour accéder aux valeurs de déformations locales dans les structures STI. Cette méthode est bien adaptée au caractère périodique des réseaux de lignes de silicium et de plus, est non destructive. Elle a été développée au laboratoire TECSSEN^(*) au sein du groupe 'Contraintes mécaniques dans les objets de petites dimensions' et sa faisabilité avait été démontrée au cours de la thèse d'Audrey Loubens [Lou06]. Les mesures ont été réalisées sur un diffractomètre 4 cercles avec une source de laboratoire ou bien au rayonnement synchrotron. Les mesures par diffraction X ont été accompagnées par

des simulations des déformations et des contraintes par la méthode des éléments finis à l'aide du logiciel FEMLAB et des calculs de cartographies de l'espace réciproque afin de valider les simulations (Logiciel MATLAB).

Dans le premier chapitre, le procédé STI, qui est au cœur des travaux de cette thèse, sera présenté. Nous distinguerons deux variantes dans le procédé, entre le flux standard (STI-Std) et le procédé baptisé auto-aligné (ou Self Aligned-STI). Les paramètres géométriques décrivant les tranchées seront également décrits. En seconde partie de ce chapitre, les notions usuelles d'élasticité anisotrope (tenseurs de déformations et de contraintes, loi de Hooke, notation de Voigt) seront introduites. La modélisation mécanique par éléments finis employée ainsi que les résultats que nous avons obtenus à l'aide du logiciel FEMLAB sont présentés dans la dernière partie de ce chapitre. Les résultats pour deux orientations de lignes seront notamment confrontés avec un modèle composite. L'effet sur les déformations et les contraintes de la période, de la largeur des lignes et de leurs hauteurs sera également exposé.

Dans le deuxième chapitre, nous allons présenter les principales techniques de mesures de déformations locales qui peuvent s'appliquer à des problématiques de la microélectronique. Le principe ainsi que les avantages des différentes méthodes seront donnés. Les techniques sont classées suivant trois catégories : les méthodes optiques, les méthodes dites électroniques et les méthodes utilisant la diffraction des rayons X. Nous argumenterons le choix de la diffraction X haute résolution à la fin du chapitre.

La première partie du troisième chapitre porte sur les principes de base de la diffraction de rayons X et plus particulièrement dans le cas d'échantillons périodiques déformés. Les protocoles expérimentaux et les simulations de cartographies de l'espace réciproque sont ensuite décrits et l'influence de la période des échantillons (de 2 μm à 200 nm) sur les spectres est présentée. Enfin un programme d'ajustement des cartographies expérimentales à partir d'un modèle mécanique est exposé.

Dans le dernier chapitre, nous allons étudier les deux procédés de fabrication des tranchées STI : le procédé STI dit standard (STI Std) et le Self Aligned STI (SA-STI). Le but de cette étude est de savoir quelle technologie introduit le moins de contraintes dans le silicium. Nous allons également étudier l'apparition des contraintes au cours du procédé SA-STI en mesurant les déformations lors des étapes clés de fabrication. Nous allons ensuite détailler l'effet de variations de géométrie (largeur, hauteur des lignes, etc.) et de procédé (oxyde de remplissage) avant de finir le chapitre avec des mesures de diffraction sur des structures plus complexes et même des produits mémoires réels.

(*) Institut Matériaux, Microélectronique et Nanosciences de Provence à partir du 01/01/08

Références :

- [Arg07] R. Arghavani et al., IEEE 54 (2), 362 (2007)
- [Bry94] A. Bryant, W. Hansch and T. Mii, 'Characteristics of CMOS Device Isolation for the ULSI Age', IEDM Tech. Dig., 671 (1994).
- [Clé04] L. Clément, R. Pantel, L. F. T. Kwakman and J. L. Rouvière, Apply. Phys. Lett 85(3), 1 (2004).
- [Clé06] L. Clément, 'Mesure des déformations et des contraintes par diffraction électronique en faisceau convergent (CBED)', thèse de l'Université Joseph Fourier (2006).
- [Faz93] P.C. Fazan and V.K. Mathews, 'A highly Manufacturable Trench Isolation Process for Deep Submicron DRAMs', IEDM Tech. Dig., 57 (1993).
- [Gal03] C. Gallon, 'Impact des contraintes mécaniques sur les composants CMOS avancés, thèse, D.R.T. INPG, 2003.
- [Lou06] A. Loubens, 'Champ de déformation induit dans un monocristal par un réseau de dimension submicroniques : diffraction des rayons X en mode haute résolution et simulation par éléments finis', Thèse de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne et de l'Université Jean Monnet de Saint-Etienne (2006).
- [Rom06] E. Romain-Latu, 'Mesures de contraintes par spectroscopie et imagerie Raman dans des dispositifs micro-électroniques', thèse de l'INP Grenoble (2007).
- [Wel94] J. Welsler, J. Hoyt, and J. Gibbons, IEEE Electron Device Lett. 15, 100 (1994).

CHAPITRE I

**Le procédé STI :
Fabrication et
contraintes mécaniques induites**

Introduction

Les structures étudiées durant ces travaux de thèse proviennent toutes de la société ATMEL. Atmel Corporation est un leader industriel dans le design et la fabrication de semi-conducteurs avancés et plus particulièrement de microcontrôleurs, de mémoires non-volatiles (NVM), de composants pour les radio-fréquences et de détecteurs. Ces fonctionnalités sont commercialisées sous forme de produits standards, de produits standards à applications spécifiques (ASSPs) et de produits sur mesure (ASICs). Ces produits sont communément appelés circuits intégrés. Une des spécificités d'ATMEL est la fabrication de mémoires non-volatiles à forte densité d'intégration. Ce type de produit présente des dimensions particulièrement agressives (petites par rapport au nœud technologique auquel elles appartiennent), afin de stocker un maximum d'informations sur un minimum de place. La diminution des dimensions des mémoires les rend très sensibles aux contraintes mécaniques. Si les contraintes deviennent trop élevées, on peut voir apparaître des dislocations (Figure I-1) qui sont néfastes à la fiabilité des mémoires.

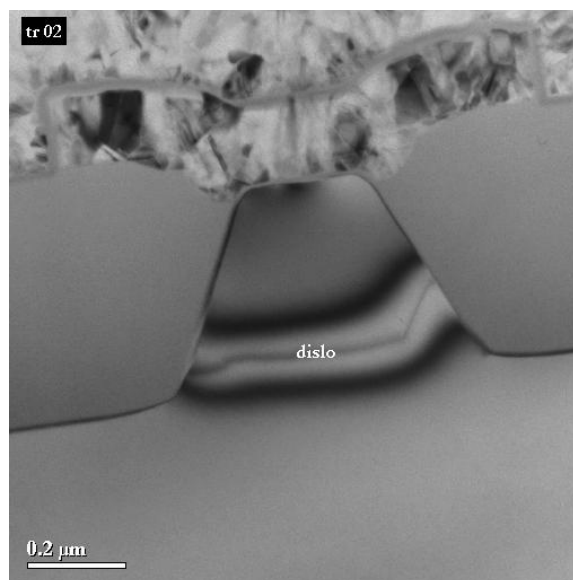


Figure I- 1: Coupe vue au microscope électronique à transmission montrant une dislocation dans le silicium de part en part d'un point mémoire non-volatile.

◆ Qu'est qu'un circuit intégré ?

C'est un composant constitué d'un boîtier muni de broches de connexions électriques. Dans ce boîtier se trouve un circuit de silicium constitué d'un réseau de transistors interconnectés entre eux, constituant des fonctions logiques ou analogiques. Les étapes de la fabrication des circuits intégrés sont résumées dans la Figure I- 2.

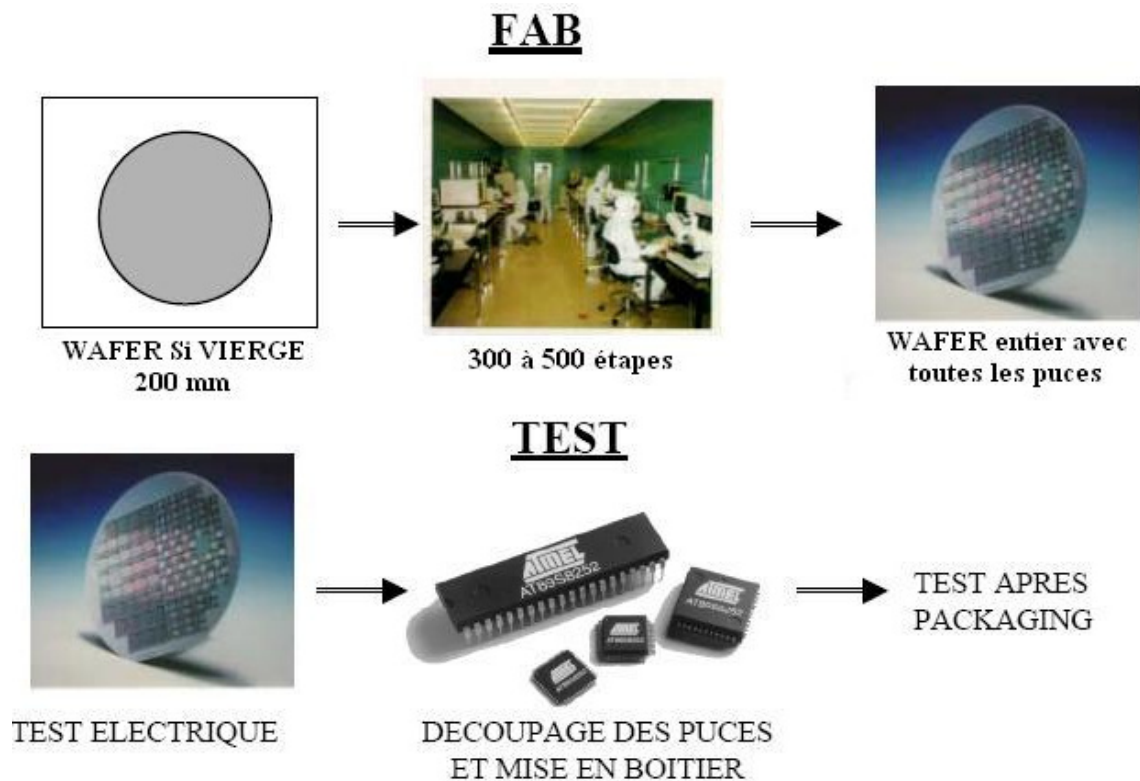


Figure I- 2: Schéma montrant les différentes étapes de fabrication d'un circuit intégré.

Le temps de fabrication d'un circuit intégré varie de un mois à plus de deux mois (jusqu'à 500 étapes) et le coût de fabrication d'un circuit intégré est très élevé (> 500 euros pour un wafer de 200 mm). Pour s'affranchir des contaminations (par des poussières présentes dans l'air ou de produits organiques par exemple) on travaille dans un lieu d'une grande propreté concernant l'eau, l'air et les produits chimiques : la salle blanche. On parle souvent dans ce cas de 'Clean Concept', il s'agit de l'ensemble des règles qui visent à maintenir cet environnement propre et contrôlé.

◆ Comment cela fonctionne ?

Le transistor MOS (Metal Oxide Semiconductor) est la brique de base de tous les circuits. Il est constitué, de trois éléments : La source, le drain et la grille. La grille est composée, d'un oxyde de grille (isolant), et de polysilicium fortement dopé (conducteur) (voir Figure I- 3). La dimension latérale de cette grille sert de référence pour indiquer le nœud technologique utilisé (par exemple 90nm). C'est grâce à leur nombre et à leur agencement que l'on obtient des circuits plus ou moins complexes. Ils sont fabriqués par la succession de multiples dépôts de matériaux conducteurs, semi-conducteurs ou isolants.

Le transistor est dit passant lorsque la tension appliquée sur la grille permet le passage d'un courant entre le drain et la source. La tension minimum à appliquer pour que le transistor soit passant est appelée tension de seuil. Lorsque ce courant est nul, le transistor est dit bloqué.

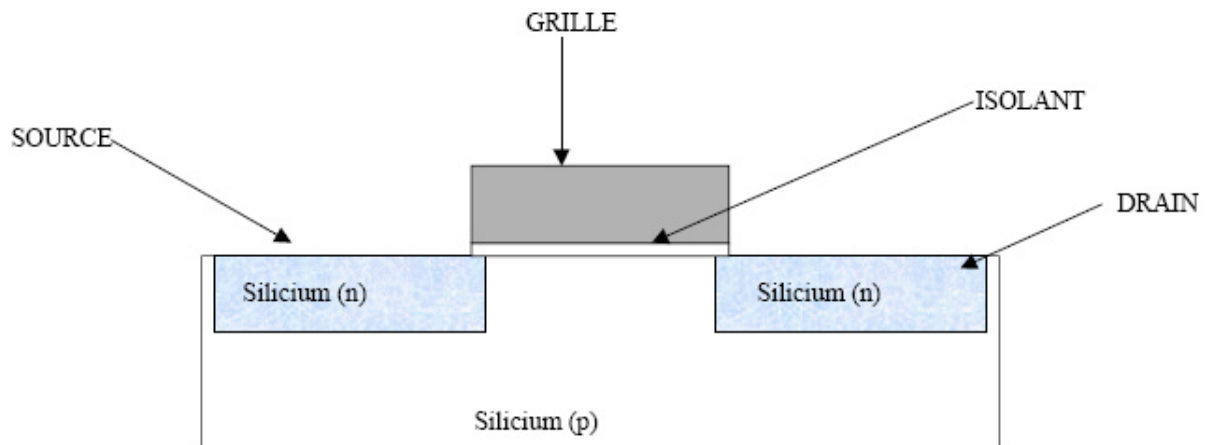


Figure I- 3: Schéma d'un transistor MOS de type N.

Pour obtenir un circuit fonctionnel, il faut relier les transistors entre eux. C'est là qu'interviennent les différentes connections : les 'contacts' relient les trois composants du transistor au premier niveau de métal (transistor→Métal) et les 'vias' assurent les liaisons entre les bandes de métal (Métal→Métal). Une fois le circuit terminé, il sera protégé des agressions extérieures (rayures, humidité,...) par un dépôt d'une couche de passivation (couche isolante d'oxyde et oxynitride de silicium). Cette partie de la fabrication est appelée 'Back-End Of the Line' ou usuellement BEOL.

◆ A quoi sert une mémoire ?

L'intérêt d'une mémoire est de stocker une information sous forme binaire. Elle peut avoir deux états distincts : l'état 1 ou l'état 0. On distingue plusieurs types de mémoires : les mémoires volatiles (nécessitant d'être constamment alimentées) type SRAM (Static Random Access Memory) ou DRAM (Dynamic Random Access Memory) et les mémoires non volatiles qui gardent l'information même sans alimentation. Il existe différentes mémoires non volatiles :

- ROM : Read Only Memories. La programmation de la mémoire est faite pendant la fabrication. L'information ne peut être modifiée ultérieurement.
- EPROM : Electrically Programmable and UV erase ROM. Ces mémoires peuvent être programmées électriquement mais elles sont uniquement effaçables au rayonnement UV.
- EEPROM : Electrically Erasable and Programmable ROM. Ces mémoires sont programmables et effaçables électriquement. Ce type de mémoire est utilisé par ATMEL et se trouve dans les applications de type carte SIM (System In Module) pour téléphone portable, 'télé payante', carte à puce sécurisée (carte bleue, carte vitale), etc...

La mémoire de type EEPROM peut être réalisée de plusieurs manières. La plus utilisée jusqu'à présent étant la mémoire à grille flottante. Le principe de la grille flottante est de piéger les charges dans une grille non-interconnectée. Les charges restent sur la grille même sans aucune source de courant. Pour réaliser cette grille flottante, on utilise couramment un dépôt de poly-silicium supplémentaire, encapsulé par un diélectrique. Sur la Figure I- 4, on peut voir son principe de fonctionnement.

La tension de seuil devient haute (Voltage Threshold High : VTH) lorsque les électrons sont stockés dans la grille flottante. Si les électrons ont été retirés de la grille flottante, la tension de seuil de ce transistor devient beaucoup plus basse (Voltage Threshold Low : VTL).

La différence de comportement de la tension de seuil permet alors d'obtenir deux états distincts (état 1 et état 0) lorsque l'on se place à une tension intermédiaire « sense threshold ». On peut ainsi 'lire' l'état sans le modifier.

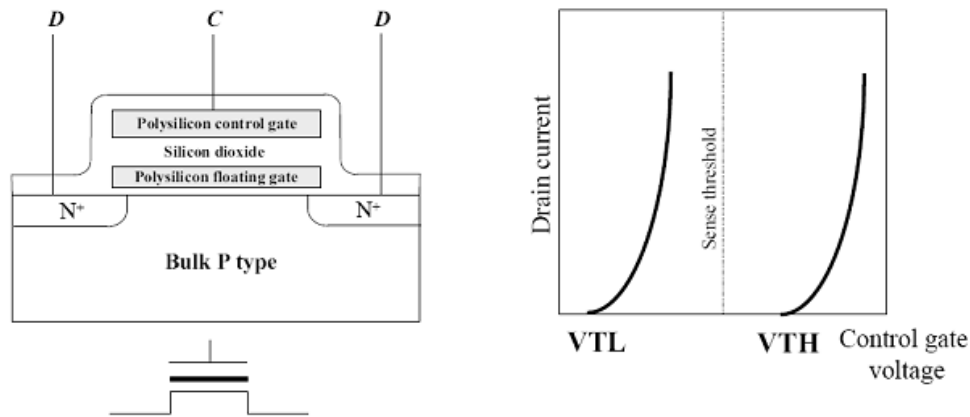


Figure I- 4: Représentation schématique de la grille flottante et des courants de seuil.

Il y a également des essais en cours (notamment au sein d'ATMEL) pour réaliser des grilles flottantes discrètes ; il s'agit par exemple de nano-cristaux de silicium encapsulés par un diélectrique [Jac07].

Il existe aussi des mémoires de type SONOS (Silicium-Oxyde-Nitride-Oxyde-Silicium) où les charges seraient stockées dans une couche de nitride [Cho06, Sch04]. D'autres types de mémoires émergentes, qui n'utilisent plus l'approche de la grille flottante, sont également en cours de développement [Mul04, Pri05] : FeRAM (Ferro électrique), MRAM (magnétique) ou PCM (Phase Change Memory). Ces dernières utilisent la différence de résistivité du matériau entre son état amorphe et cristallin [Ott04].

◆ Quand interviennent les tranchées STI ?

Les tranchées STI (Shallow Trench Isolation), ou tranchées d'isolation peu profondes en français, interviennent au tout début du procédé de fabrication des dispositifs. Ce sont les étapes de 'Front End', par opposition au 'Back End'. La fabrication des tranchées STI consiste à graver des tranchées dans le silicium puis à les remplir d'oxyde afin d'isoler des zones de silicium entre elles (appelées zones actives) sur lesquelles seront faits les transistors ou mémoires dans la suite du procédé [Faz93, Bry94]. La fabrication de ces tranchées se fait indifféremment du type de composant. Depuis quelques années maintenant, le procédé STI s'est imposé pour l'isolation des dispositifs de la microélectronique au détriment du procédé LOCOS (LOCAL Oxidation of Silicon) [App70, App71, Koo71]. Ce procédé a permis d'obtenir un gain important en densité d'intégration et de mieux contrôler les contraintes mécaniques.

Les travaux présentés dans ce manuscrit ont été réalisés sur des structures spécifiques et représentatives des technologies mémoires non-volatiles en développement et en production à ATMEL ROUSSET.

Ce chapitre décrira dans un premier temps le procédé appelé Shallow Trench Isolation (STI), qui est au cœur des travaux de cette thèse. Les notations usuelles et les notions de mécanique nécessaires à la compréhension des résultats de ce travail de thèse sont ensuite introduites. La modélisation mécanique par éléments finis ainsi que les résultats que nous avons obtenus à l'aide du logiciel FEMLAB seront présentés dans une troisième partie.

1. Procédé de fabrication

1.1 Les principales étapes

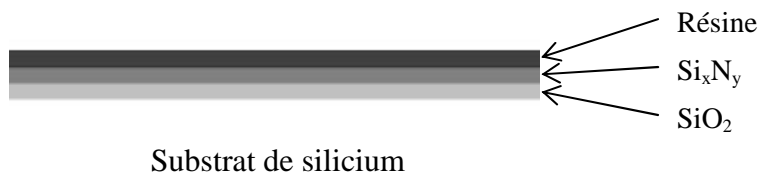
Le procédé de fabrication des tranchées STI est constitué de nombreuses étapes. Nous allons dans ce paragraphe détailler les étapes 'clés' intervenant dans le procédé. Ces différentes étapes peuvent être classées suivant 6 grandes catégories :

- 1) Les étapes de **diffusion** : elles regroupent principalement les oxydations thermiques, les recuits et certains dépôts. Elles se font dans des fours (tubes de quartz). Les étapes de diffusion sont toujours précédées d'une étape de nettoyage par gravure d'un oxyde sacrificiel fin.
- 2) Les dépôts de **couches minces** : ces étapes consistent à déposer divers matériaux : les oxydes de remplissage des tranchées, les couches d'isolation, les couches de 'nitrure', etc...

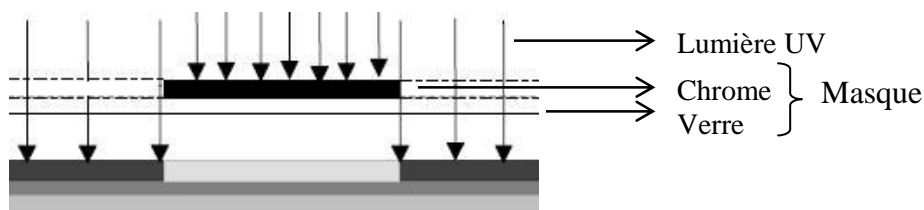
Il est à noter que les couches de nitrure de silicium sont de composition non nécessairement stoechiométrique, elles seront nommées nitrure ou Si_xN_y dans le reste du manuscrit.

- 3) La **photolithographie** : Le but de la photolithographie est d'insoler une résine photosensible avec des radiations lumineuses à travers un masque représentant le motif à reproduire sur la plaquette de silicium. La photolithographie se passe en 3 étapes : le dépôt de la résine, l'insolation et le développement (couchage d'un solvant sur la plaquette)

Dépôt de la résine :



Insolation : réaction photo-chimique de la résine avec les photons

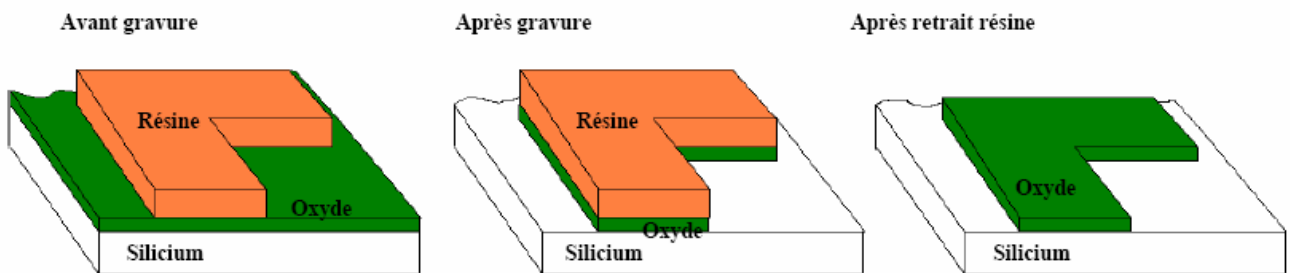


Développement : retrait de la résine insolée (pour une résine de type positive)



Après développement, il ne reste que la résine sous le masque.

- 4) Les étapes de **gravure** : Elles suivent généralement les étapes de photolithographie et consistent à transférer l'image définie par la résine dans la couche inférieure (nitrure, oxyde, silicium, etc...). La couche qui se trouve sous la résine va être protégée lors de la gravure.



On distingue 2 types de gravures :

La gravure chimique dite humide (ou 'wet') car elle utilise des bains chimiques d'acide. C'est une gravure isotrope utilisée pour graver essentiellement des oxydes avec du HF et pour retirer du nitrure avec du H_3PO_4 .

La gravure plasma dite sèche (ou 'dry') dans des chambres à basse pression (Figure I- 5) qui permet une gravure anisotrope des matériaux. Elle est entre autre utilisée pour la gravure du silicium et donc des tranchées d'isolation, mais aussi pour graver les métaux, le nitrure, le poly-silicium, etc... Lorsque le plasma attaque les matériaux, il y a émission d'une radiation dont la longueur d'onde dépend du matériau à la surface. En suivant les longueurs d'onde émises, on peut suivre le procédé de gravure et savoir quand l'arrêter.

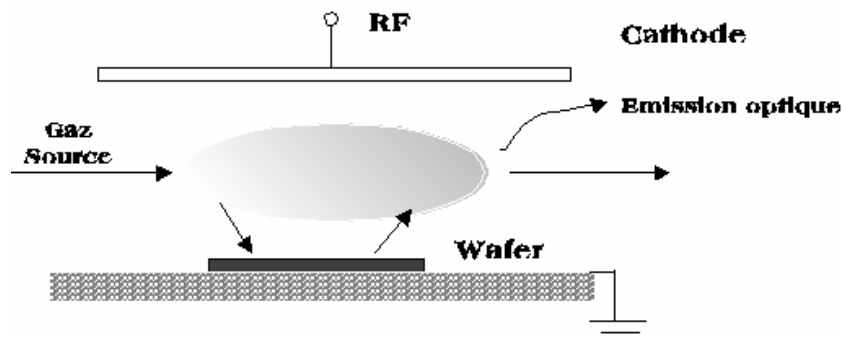


Figure I- 5: Schéma de fonctionnement d'une chambre de gravure plasma

5) Les étapes d'**implantation** :

Le but des étapes d'implantation est d'introduire des atomes donneurs ou accepteurs d'électrons dans le silicium pour modifier ses propriétés électriques. Les ions Bore (accepteurs) sont utilisés pour les dopages de type P et augmentent la densité des trous. A l'opposé les ions Phosphore et Arsenic (donneur) permettent de faire des dopages de type N qui augmente la densité des électrons. L'implantation ionique se fait à l'aide d'un faisceau d'ions dont l'énergie varie de 2 keV à 2 MeV avec un courant de quelques micro-ampères à 25mA. L'énergie du faisceau détermine la profondeur d'implantation et son courant la dose (nombre d'ions implantés par unité de surface). L'implantation endommage le silicium et crée des défauts cristallins. C'est pourquoi les étapes d'implantations sont suivies d'un recuit afin de recristalliser le silicium. Ce recuit thermique permet également de placer les dopants introduits en position substitutionnelle afin qu'ils soient électriquement actifs.

6) Les étapes de **Polissage Mécano-Chimique (CMP)**

Le polissage mécano-chimique consiste à éroder des couches épaisses (oxyde, tungstène, polysilicium) afin de rendre la surface plus plane (Figure I- 6) en utilisant :

- **un principe chimique** : fonction de la composition chimique du liquide de polissage, appelé 'slurry'. Il modifie la structure de la surface pour la rendre plus malléable.
- **un principe mécanique** : des billes dans le 'slurry' frottent la surface du wafer et retirent la partie malléable.

Le CMP est devenu obligatoire pour les technologies inférieures à 0,35 micron car il facilite l'étape de photolithographie. Comme en photographie classique, plus on veut de précision, plus la profondeur de champ est étroite. Si le relief lié à l'empilement de tous les niveaux successifs est supérieur à cette profondeur de champ, alors la photolithographie est impossible. Par conséquent, en améliorant la planéité de la surface, cela permet de gagner en précision lors de la photolithographie. De plus, les couches successives sont mieux alignées ce qui améliore le rendement global.

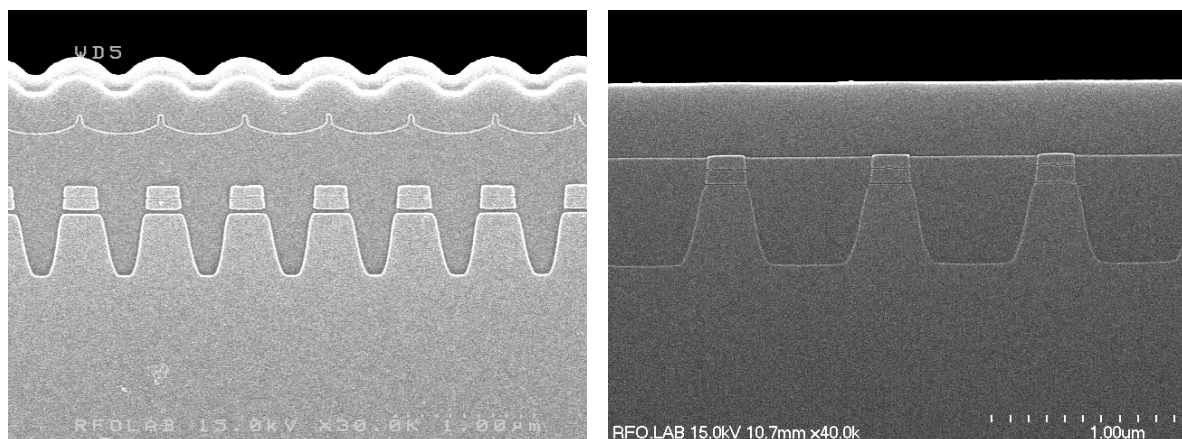


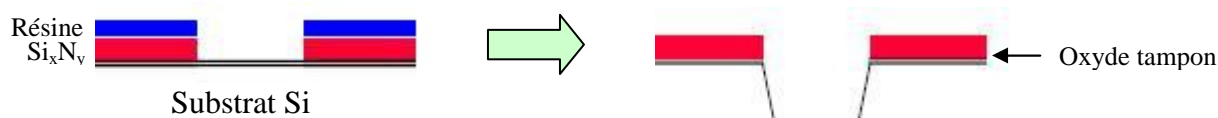
Figure I- 6: Coupes SEM montrant des tranchées STI après remplissage (gauche) et après CMP (droite). La couche supérieure est déposée pour permettre une meilleure visualisation au MEB.

1.2 La fabrication des tranchées

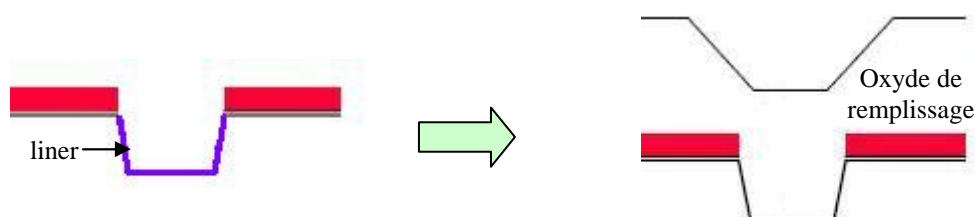
La fabrication des structures STI consiste à graver des tranchées dans le silicium puis à les remplir d'oxyde afin d'isoler les zones actives de silicium entre elles. Nous allons décrire dans ce paragraphe les étapes élémentaires de fabrication. Le procédé sera décrit de manière globale et s'applique ainsi à l'ensemble des produits. Les détails de fabrication : températures, épaisseur des couches, profondeur des tranchées, etc. seront précisés dans le paragraphe 1.2.3.

1.2.1 STI Standard

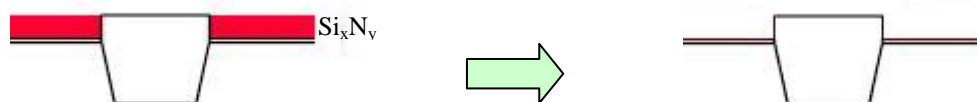
Des couches de nitrure et de résine sont déposées sur le substrat et insolées par photolithographie, le substrat de silicium est ensuite gravé (gravure plasma) pour définir les tranchées.



Après une oxydation thermique pour former le liner (oxyde thermique fin), qui a pour but d'améliorer l'interface SiO₂/Si et de passiver la surface de Si, les tranchées sont remplies d'oxyde de silicium par dépôt.



Enfin, l'excès d'oxyde de remplissage, qui a tapissé tout le wafer, est supprimé par le polissage mécano-chimique qui s'arrête sélectivement sur la couche de nitrure. Cette couche est retirée juste après le polissage. La dernière étape consiste en une densification de l'oxyde par recuit thermique pour améliorer ses propriétés tout en conservant la structure inchangée. Les zones de silicium ainsi formées et isolées les unes des autres sont appelées 'actives' et elles forment le point de départ de ce qui deviendra un transistor, point mémoire, etc. Les autres couches nécessaires à la fabrication du produit (Poly-Silicium, nitrure...) sont ensuite déposées puis conservées sélectivement par photolithographie sur les régions actives de Si.



En classant les étapes comme au début de ce chapitre (paragraphe I-1.1), on peut donner un récapitulatif du procédé STI Standard sous forme d'un diagramme en Figure I- 7.

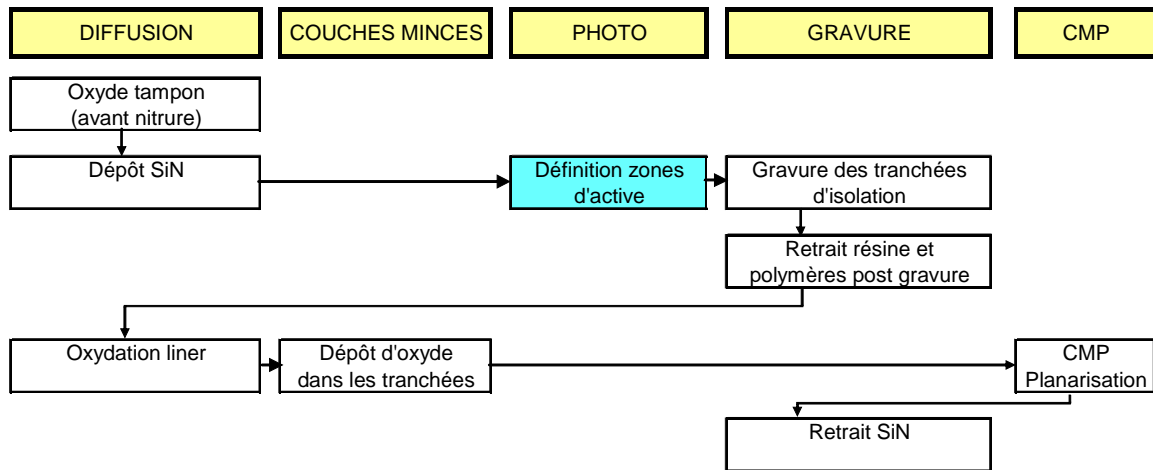


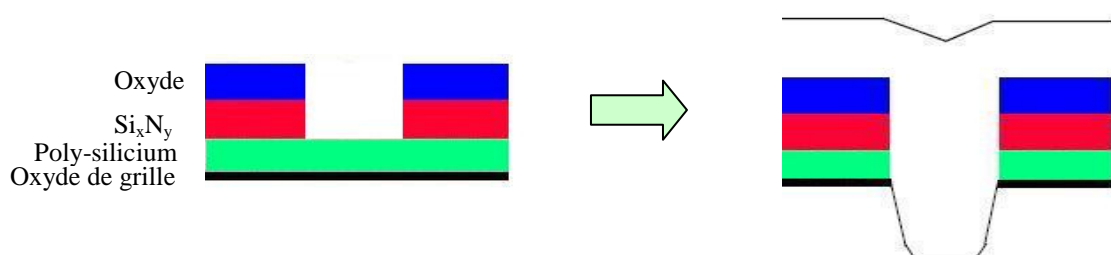
Figure I- 7: Diagramme représentant l'ordre des différentes étapes du procédé STI Std.

1.2.2 Self Aligned-STI

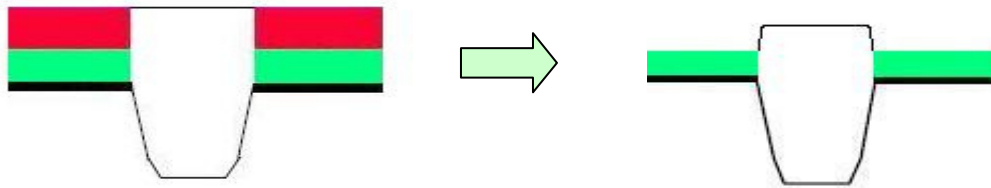
Le procédé de fabrication STI décrit dans le paragraphe précédent est le procédé le plus couramment employé dans la micro-électronique. Cependant, certains produits de la compagnie ATMEL sont réalisés en utilisant une approche légèrement différente pour la fabrication des tranchées STI. Dans ce paragraphe, nous allons décrire ce procédé, appelé Self-Aligned STI (SA-STI) ou STI auto-aligné.

En STI standard, la fabrication des tranchées d'isolation intervient dès le début du procédé. Les autres étapes clés de la création du dispositif (implants de caisson, les oxydes de grille, les grilles poly-silicium) ne sont faites qu'après le remplissage des STI. Par contre dans une approche SA-STI, les transistors sont en partie réalisés avant la gravure et le remplissage des STI. L'implantation des caissons, l'oxyde de grille et la grille en poly-silicium sont donc réalisés en pleine plaque. L'avantage majeur est l'auto-alignement de la grille de poly-silicium par rapport à la zone active. Cela permet un gain de densité en diminuant la taille des cellules.

Toutes les couches (dans l'ordre : oxyde de grille, poly-silicium, nitrure, oxyde et résine) sont déposées puis gravées en 2 étapes. La résine sert de masque pour la gravure de l'oxyde et du nitrure. Puis après retrait de la résine, l'oxyde sert à son tour de masque (il est aussi appelé 'hardmask') pour la gravure du poly-silicium et de la tranchée. De cette manière, les couches sont auto-alignées sur le bord de la tranchée. Après formation du liner, les tranchées sont remplies comme en STI standard.



Le CMP permet de planariser la surface en retirant l'oxyde. La couche de nitrure restante est ensuite retirée, il reste alors l'oxyde de grille et le poly-silicium directement sur l'active.



Pour les échantillons ayant subi un procédé STI standard, il restera les implantations des caissons, les formations des oxydes de grille ainsi que le dépôt des grilles poly-silicium pour arriver à l'étape décrite sur le dernier schéma du procédé SA-STI. Les échantillons passant par le procédé STI Standard auront alors subi les mêmes étapes que ceux passant par le procédé SA-STI. Cependant, certaines étapes peuvent être plus difficiles à réaliser une fois les tranchées STI fabriquées.

On peut donner un récapitulatif du procédé SA-STI sous forme d'un diagramme (Figure I- 8) :

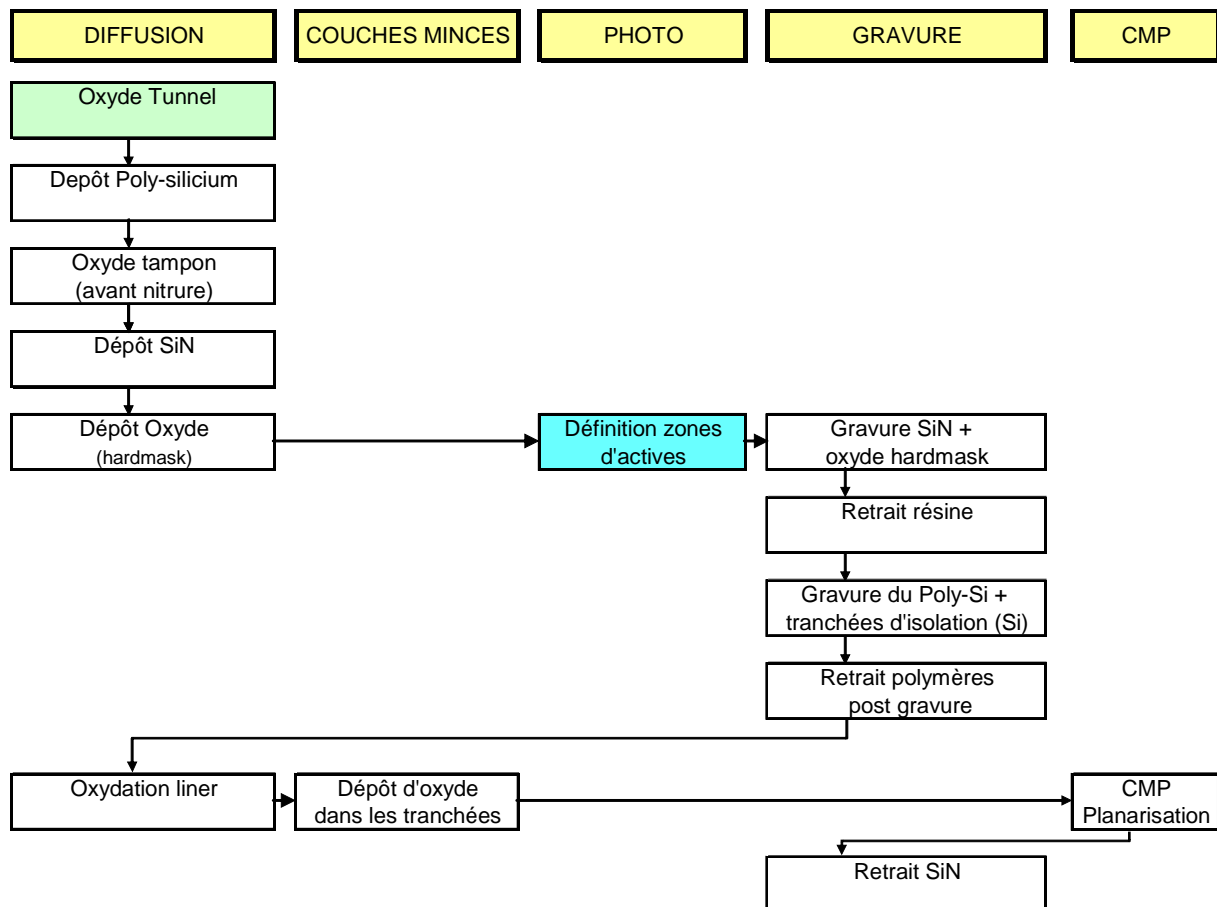


Figure I- 8: Diagramme représentant l'ordre de réalisation des différentes étapes du procédé SA-STI

A partir de cette étape, les deux procédés de fabrication des dispositifs sont identiques : gravure des grilles poly silicium, isolation des grilles flottantes (pour les produits mémoires), implantation des zones drain et source, puis interconnexion.

1.2.3 Les variables du procédé

Les paramètres de fabrication sont modifiés en fonction des dispositifs (transistors, mémoires EEPROM ou flash) et des fonctionnalités du produit final. Des échantillons représentatifs des mémoires EEPROM et flash ont été étudiés lors de ces travaux. Un exemple de produit EEPROM avec le détail d'un point mémoire est montré en Figure I- 9.

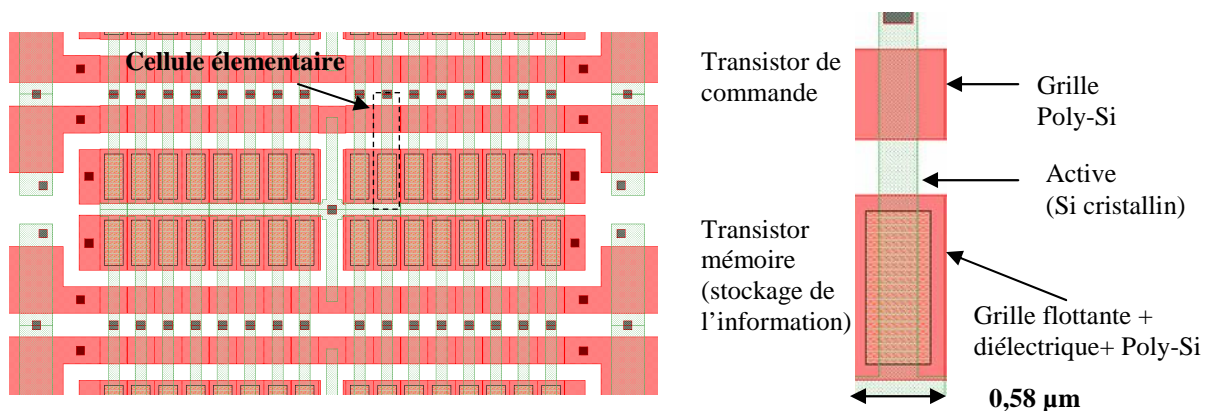


Figure I- 9: Exemple de produit avec une cellule EEPROM

Les variations d'un procédé à l'autre sont d'ordre géométrique (période, largeur des actives, profondeur des tranchées), d'autres proviennent des conditions ou des matériaux utilisés. Dans ce travail de thèse nous nous sommes intéressés à l'influence de ces paramètres sur le champ de contrainte dans la zone active de silicium, entre les tranchées. La gamme de variation de ces paramètres est détaillée dans le paragraphe ci-dessous. Leurs effets sur les déformations seront développés dans les chapitres III et IV.

Variations géométriques :

Les variations géométriques concernent la période (p), la largeur des lignes de Si (b), la profondeur des tranchées (h), l'épaisseur du liner (oxyde thermique fin) formé avant remplissage des STI (e) et le Top Corner Rounding (TCR). Ces paramètres sont donnés dans la Figure I- 10 ci-dessous :

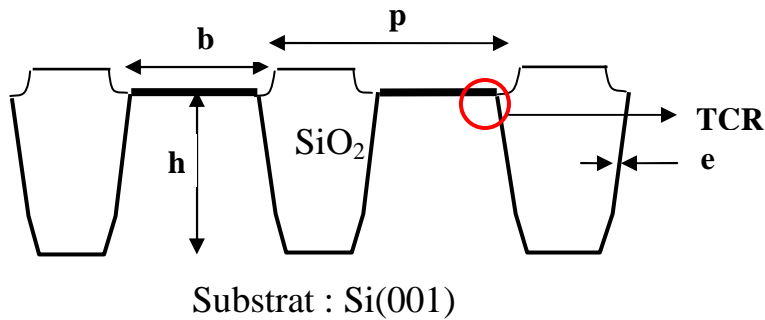


Figure I- 10: Schéma représentant les variations géométriques sur les échantillons étudiés. p est la période, b la largeur des lignes, h la profondeur des tranchées, e l'épaisseur du liner et TCR le Top Corner Rounding.

- ◆ Les valeurs possibles de p sont $2\ \mu\text{m}$, $580\ \text{nm}$ (équivalent à une technologie $150\ \text{nm}$, voir Figure I- 9), $300\ \text{nm}$ (technologie $130\ \text{nm}$) et $200\ \text{nm}$ (technologie $90\ \text{nm}$). Pour $p=2\ \mu\text{m}$, $b=1\ \mu\text{m}$. Pour les autres valeurs de p , b varie également. Pour $p=580\ \text{nm}$, b vaut $220\ \text{nm}$ ou $320\ \text{nm}$. Pour les périodes les plus petites, de nombreuses largeurs d'actives étaient disponibles. Pour $p=300\ \text{nm}$, b varie entre $110\ \text{nm}$ et $150\ \text{nm}$, pour $p=200\ \text{nm}$, b varie entre $60\ \text{nm}$ et $100\ \text{nm}$.
- ◆ Pour ce qui est de la hauteur des tranchées, le paramètre h vaut $250\ \text{nm}$ ou $410\ \text{nm}$.
- ◆ L'épaisseur du liner e peut être de $10\ \text{nm}$ ou $15\ \text{nm}$.
- ◆ Pour limiter les contraintes à la surface et éviter les amincissements des oxydes de grille en bord d'active, on introduit ce qui est appelé le TCR ou 'Top Corner Rounding'. Ce TCR consiste à modifier les coins supérieurs des zones d'actives (cercle rouge sur la Figure I- 10). Les étapes de réalisation du TCR entraînent une légère augmentation de la largeur de la ligne de Silicium (b). Son effet a également été étudié [Sal97].

Variations de matériaux et de conditions de remplissage :

Ces variations concernent le type d'oxyde de remplissage des tranchées, le recuit qui suit le remplissage, les conditions de fabrication du liner. Les résultats sur l'étude de ces paramètres seront développés dans le chapitre IV.

- ◆ Le remplissage des tranchées s'est fait avec un oxyde déposé soit par HDP (High Density Plasma) à 750°C , soit avec du TEOS/ O_3 (Tetra-Ethyl-Ortho-Silicate/Ozone) à 540°C . Selon les débits de TEOS et d'Ozone et les recuits qui suivent, l'oxyde a un comportement mécanique très différent. Un remplissage avec du tungstène a été également testé, même si bien évidemment il n'appartient pas à un procédé de fabrication de produits. Il a été employé afin de mettre les zones actives de silicium en tension dans le sens du canal.

- ◆ L'influence du recuit suivant le remplissage a été testé en le supprimant et en changeant sa température : 950°C au lieu de 850°C.
- ◆ Des liners de 10 nm formés dans 3 conditions différentes ont été mesurés sur des échantillons de période $p=200$ nm pour voir leurs effets sur les déformations. Les conditions d'élaboration de ces 'liners' sont : 1) oxydation sèche à 900°C - 2) oxydation humide à 1050°C - 3) oxydation ISSG (In Situ Steam Generation, oxydation par radicaux) à 900°C avec 2% de H₂.

1.2.4 En conclusion

Nous avons décrit dans cette partie les étapes 'clés' intervenant dans le procédé STI. Nous avons également vu qu'il existait deux variantes de ce procédé : Le STI standard (STI-Std) et le Self Aligned STI (SA-STI). Dans le procédé STI-Std, la définition des actives de silicium est faite en premier. L'oxyde de grille ainsi que d'autres étapes sont donc fabriquées sur des structures déjà gravées. Dans le SA-STI, l'oxyde de grille est formé avant la gravure. Le polysilicium est gravé en même temps que le silicium, il est donc aligné avec le silicium. Enfin, nous avons détaillé les variables du procédé avec les paramètres qui seront étudiés dans les chapitres suivants avec des largeurs de lignes allant de moins de 100 nm à 1 μ m.

2. Mécanique des milieux continus

Ce paragraphe rappelle quelques notions et notations usuelles dans le cadre de la théorie de l'élasticité linéaire. Ces bases sont nécessaires à la compréhension des études qui font suite à ce chapitre, notamment l'effet de l'anisotropie du silicium sur les contraintes. Plus de détails peuvent être trouvés dans les références [Nye57], [Tim70] ou [Lan86].

On peut définir l'élasticité comme le domaine pour lequel un matériau retourne à son état initial lorsque l'on supprime toute sollicitation. Dans ce domaine, les déformations sont donc réversibles. De plus dans la limite des petites sollicitations la relation entre déformations et contraintes est linéaire.

Le repère (O,x,y,z) est le repère du laboratoire défini par rapport aux lignes de silicium. L'axe x est perpendiculaire aux lignes dans le plan de l'échantillon, l'axe y se trouve le long des lignes et l'axe z est perpendiculaire à la surface.

2.1 Déformations et contraintes

Soit \vec{u} le déplacement d'un point du solide par rapport au solide non déformé. On décrit le champ de déformation par la relation suivante, dans la limite des petites déformations :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \text{ avec } i,j = x, y, z \quad (1)$$

L'équation (1) étant symétrique, $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$. Les déformations et les contraintes sont des tenseurs d'ordre 2. Ceux-ci sont symétriques, d'ordre 2 et possèdent donc 6 composantes. Dans la base (O,x,y,z), ils peuvent être représentés par une matrice 3*3 :

$$\overline{\boldsymbol{\varepsilon}} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad \overline{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (2)$$

2.1.1 La loi de Hooke

La relation entre $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}$ et $\overline{\boldsymbol{\sigma}}$ est appelée la loi de Hooke et s'écrit en notation contractée :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \Leftrightarrow \varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (3)$$

Les constantes C_{ijkl} sont habituellement nommées rigidités ou coefficients d'élasticité et les constantes S_{ijkl} souplesses. Les tenseurs $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}$ et $\overline{\boldsymbol{\sigma}}$ étant de rang 2, les tenseurs $\overline{\boldsymbol{C}}$ et $\overline{\boldsymbol{S}}$ sont de rang 4 et possèdent donc $3^4 (= 81)$ composantes. En écrivant l'énergie élastique, on arrive à 36 composantes indépendantes. Mais comme $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}$ et $\overline{\boldsymbol{\sigma}}$ sont symétriques, on peut écrire la relation suivante :

$$X_{ijkl} = X_{ijlk} = X_{jikl} = X_{jilk} = X_{klij} \quad \text{avec } X = C \text{ ou } S \quad (4)$$

On obtient finalement 21 composantes indépendantes dans le cas général. Le nombre de composantes indépendantes diminue ensuite en fonction de la symétrie de la structure considérée.

2.1.2 Représentation matricielle de VOIGT

Les tenseurs $\overline{\boldsymbol{\varepsilon}}$ et $\overline{\boldsymbol{\sigma}}$ possèdent chacun 6 valeurs indépendantes et les tenseurs $\overline{\boldsymbol{C}}$ et $\overline{\boldsymbol{S}}$ 21 valeurs indépendantes. Pour faciliter l'écriture de ces tenseurs, Voigt a proposé d'écrire les tenseurs de rang 2 en vecteur colonne à six composantes et les tenseurs de rang 4 en matrices carrées 6*6, sachant qu'il existe 21 composantes indépendantes dans une matrice 6*6 symétrique. Cette notation matricielle est très pratique pour la représentation de ces tenseurs, notamment pour écrire facilement les relations entre les déformations et les contraintes.

Pour les tenseurs de rang 2 dans un repère (O,x,y,z), l'ordre conventionnel des coefficients indépendants est le suivant :

$$\begin{pmatrix} xx & xy & xz \\ xy & yy & yz \\ xz & yz & zz \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 6 & 5 \\ 6 & 2 & 4 \\ 5 & 4 & 3 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Pour les tenseurs de rang 4, la notation est la suivante (ici pour le tenseur $\overline{\boldsymbol{C}}$)

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix} = \overline{\overline{C}} \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{xz} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad (6)$$

Soit $i, j = x, y, z$ et m la notation de Voigt correspondante au couple (i, j) . On remarquera que $\sigma_{ij} = \sigma_m$ quelque soit i et j alors que $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_m$ pour $i=j$ et $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_m/2$ pour $i \neq j$

Pour le tenseur $\overline{\overline{C}}$, quelque soit i, j, k et l , $C_{ijkl} = C_{mn}$. L'indice m en notation de Voigt s'obtient à partir des coefficients i, j et l'indice n à partir des coefficients k et l . Pour le tenseur $\overline{\overline{S}}$, le passage en notation de Voigt est un peu plus complexe et dépend des valeurs de m et n :

$$S_{ijkl} = S_{mn} \text{ si } m \text{ et } n \leq 3 ; S_{ijkl} = \frac{1}{2} S_{mn} \text{ si } m \text{ ou } n > 3 ; S_{ijkl} = \frac{1}{4} S_{mn} \text{ si } m \text{ et } n > 3.$$

L'intérêt de ces règles de notations est de toujours pouvoir écrire la loi de Hooke, même en notation de Voigt (équation 7)

$$\sigma_i = C_{ij} \varepsilon_j \quad \text{et} \quad \varepsilon_i = S_{ij} \sigma_j \quad (7)$$

avec i et j compris entre 1 et 6.

2.1.3 Système cubique

Dans le cas d'un système cubique, seules 3 composantes des tenseurs sont indépendantes et non nulles. Les tenseurs $\overline{\overline{C}}$ et $\overline{\overline{S}}$ s'écrivent alors sous la forme suivante dans le repère cristallographique ($[100], [010], [001]$) :

$$\overline{\overline{C}} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \overline{\overline{S}} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{pmatrix} \quad (8)$$

On peut exprimer les coefficients C_{mn} en fonction des S_{mn} et inversement de la manière suivante :

$$C_{11} = \frac{S_{11} + S_{12}}{(S_{11} - S_{12})(S_{11} + 2S_{12})}$$

$$C_{12} = \frac{-S_{12}}{(S_{11} - S_{12})(S_{11} + 2S_{12})} \quad (9)$$

$$C_{44} = \frac{1}{S_{44}}$$

Pour le silicium monocristallin, les valeurs des C_{ij} sont les suivantes [Bra73] :

$$C_{11}=166,7 \text{ GPa} \quad C_{12}=63,9 \text{ GPa} \quad C_{44}=79,6 \text{ GPa}$$

On définit à présent le coefficient d'anisotropie A. Ce coefficient représente la différence de comportement mécanique du matériau en fonction de la direction cristallographique. Le coefficient d'anisotropie A est habituellement donné à partir des 3 coefficients indépendants du matériau cubique (Equation 10). Plus ce coefficient est élevé, plus le matériau est anisotrope. Pour le silicium, A vaut 1,55 alors qu'il vaut 1 pour un matériau totalement isotrope comme le tungstène ou 3,2 pour un matériau fortement anisotrope comme le cuivre.

$$A = \frac{2.C_{44}}{(C_{11} - C_{12})} \quad (10)$$

Dans le cas du silicium, le module de Young dépend donc de l'orientation du silicium, le rapport $\frac{E_{Si[111]}}{E_{Si[100]}}$ vaut 1,43, où $E_{Si[111]}$ et $E_{Si[100]}$ sont les modules de Young du silicium dans

les directions [111] et [100]. Les valeurs du module de Young E pour le silicium en fonction de l'orientation sont données dans le Tableau I- 1, elles ont été calculées à partir des coefficients S_{ij} du silicium [Nye57] :

orientation	[111]	[110]	[100]
Si			
E (GPa)	187,5	169,3	131,2

Tableau I- 1: Module de Young du silicium suivant l'orientation [111] et [100].

2.1.4 Les matériaux isotropes

Dans le cas d'un matériau isotrope, $A = 1$, C_{44} et S_{44} ne sont donc plus des composantes indépendantes dans les tenseurs $\overline{\overline{C}}$ et $\overline{\overline{S}}$:

$$C_{44} = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \quad (11)$$

$$S_{44} = 2(S_{11} - S_{12})$$

Les coefficients de rigidité peuvent s'exprimer à l'aide de λ et μ appelés coefficients de Lamé et définis par :

$$C_{12} = \lambda \quad C_{44} = \mu \quad C_{11} = \lambda + 2\mu \quad (12)$$

Les coefficients de Lamé peuvent également être exprimés en fonction du module de Young E et du coefficient de Poisson ν :

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \quad \mu = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (13)$$

La relation $\bar{\varepsilon} = \bar{S} \cdot \bar{\sigma}$ devient :

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix} = \frac{1}{E} \begin{pmatrix} 1 & -\nu & -\nu & 0 & 0 & 0 \\ -\nu & 1 & -\nu & 0 & 0 & 0 \\ -\nu & -\nu & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2(1+\nu) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2(1+\nu) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2(1+\nu) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} \quad (14)$$

Les valeurs de E , ν et le coefficient de dilatation thermique α pour les matériaux utilisés dans le procédé STI sont données dans le Tableau I- 2 [Sen01]:

	E (GPa)	ν	α ($10^{-6} \cdot K^{-1}$)
SiO ₂ thermique	66	0,17	0,5
SiO ₂ par dépôt HDP	80	0,20	0,5
Nitride de silicium	290	0,28	3,0
Silicium Polycristallin	180	0,27	2,5 (à 0°C) – 4 (à 400°C)

Tableau I- 2: Valeurs du module de Young en GPa (E), du coefficient de Poisson (ν) et du coefficient de dilatation thermique (α) pour les matériaux intervenant dans la fabrication des tranchées STI. Les valeurs de E , ν et α pour de nombreux matériaux de la microélectronique peuvent être trouvées dans les références [Jac66, Dou96, Mae95, Ele93, Bea92, Leu93, Shi99, Col00].

Pour des températures supérieures à 200°C, la variation du coefficient de dilatation thermique du silicium peut être approximer par l'équation (15). Les courbes précises de $\alpha(\text{Si}) = f(T)$ peuvent être trouvées dans les références [Mai60, INS88].

$$\alpha(\text{Si}) = 3 \cdot 10^{-6} + 1,24 \cdot 10^{-9} \cdot T_{\text{deg.C}} \quad (15)$$

2.1.5 Exemples de sollicitations particulières

Nous appliquons les notions vues précédemment à deux types de sollicitations fréquemment rencontrées dans l'étude de couches minces. L'état de contraintes bi-axiales correspond à un dépôt uniforme sur une surface. L'état de déformations planes est fréquemment supposé lorsque l'on s'intéresse au comportement de la section d'une ligne.

◆ Contraintes bi-axiales

L'état de contraintes planes correspond à un film mince déposé sur un substrat épais. A la surface libre du film, les contraintes σ_{xz} , σ_{yz} et σ_{zz} sont nulles. Dans la mesure où le film est homogène dans le plan x,y (plaque infinie), alors les contraintes σ_{xz} , σ_{yz} et σ_{zz} sont nulles dans tout le film. On peut donc diagonaliser le tenseur des contraintes dans le plan xy, ce qui conduit à l'expression suivante, introduisant un état biaxial σ_{xx} et σ_{yy} :

$$\bar{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (16)$$

Dans le cas d'une contrainte bi-axiale isotrope dans le film, on peut noter la contrainte unique σ_0 avec $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_0$. Si E est le module de Young du film et ν son coefficient de Poisson, alors nous pouvons écrire les composantes des tenseurs de déformation et de contrainte dans le film sous la forme :

$$\bar{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad \bar{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (17)$$

avec :

$$\varepsilon_0 = \frac{1-\nu}{E} \sigma_0 \quad \varepsilon_{zz} = \frac{-2\nu}{E} \sigma_0 \quad (18)$$

Le rapport $E/(1-\nu)$ est appelé le module biaxial. Dans le substrat, nous pouvons considérer les déformations et les contraintes comme négligeables, compte tenu de l'épaisseur du substrat vis-à-vis de celle du film.

◆ Déformations planes

L'hypothèse des déformations planes est souvent utilisée pour simplifier une analyse mécanique, lorsqu'une dimension du système est très grande devant les deux autres. Supposons un système infiniment long dans la direction y . Sous l'hypothèse de déformations planes, les composantes ε_{yy} , ε_{xy} et ε_{yz} sont nulles. Les déplacements dans les directions x et z sont donc uniquement fonction de x et de z , et le déplacement dans la direction y est nul dans l'ensemble du système. On passe donc de 6 composantes dépendant de 3 variables chacune à 3 composantes à 2 variables. Si le matériau est isotrope, alors la loi de comportement du matériau permet d'obtenir les contraintes sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xx} &= \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left((1-\nu)\varepsilon_{xx} + \nu\varepsilon_{zz} \right) \\
 \sigma_{yy} &= \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left(\nu\varepsilon_{xx} + \nu\varepsilon_{zz} \right) \\
 \sigma_{zz} &= \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \left(\nu\varepsilon_{xx} + (1-\nu)\varepsilon_{zz} \right) \\
 \sigma_{yz} &= 0 \\
 \sigma_{xz} &= \frac{E}{1+\nu} \varepsilon_{xz} \\
 \sigma_{xy} &= 0
 \end{aligned} \tag{19}$$

2.2 Changement de repère

Dans la suite de ce manuscrit, nous allons étudier des réseaux de tranchées orientées [100] et [110]. Il est alors nécessaire d'exprimer $\overline{\overline{C}}$ et $\overline{\overline{S}}$ dans un repère différent du repère cristallographique, dans notre cas le repère ([110],[1-10],[001]). L'ensemble des relations énoncées pour le système cubique sont valables dans la base définie par les trois directions cristallographiques [100], [010] et [001]. Nous allons voir l'effet d'un changement de repère sur les tenseurs précédemment décrits. Pour simplifier les notations, les coefficients C_{ij} et S_{ij} seront notés avec un ' dans le nouveau repère.

La matrice de passage a_{ij} du repère cristallographique au repère ([110],[1-10],[001]) s'écrit :

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{20}$$

Pour les tenseurs de rang 2, les relations s'écrivent :

$$X'_{ij} = a_{ik} a_{jl} X_{kl} \quad \text{avec } \mathbf{X} = \boldsymbol{\sigma} \text{ ou } \boldsymbol{\varepsilon} \quad (21)$$

Pour les tenseurs de rang 4 :

$$X'_{ijkl} = a_{im} a_{jn} a_{ko} a_{lp} X_{mnop} \quad \text{avec } \mathbf{X} = \mathbf{C} \text{ ou } \mathbf{S} \quad (22)$$

Dans le nouveau repère, on peut écrire les coefficients C'_{ij} en fonction des C_{ij} :

$$\begin{aligned} C'_{11} &= \frac{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}}{2} \\ C'_{12} &= \frac{C_{11} + C_{12} - 2C_{44}}{2} \\ C'_{13} &= C_{11} \\ C'_{33} &= C_{11} \\ C'_{44} &= C_{44} \\ C'_{66} &= \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \end{aligned} \quad (23)$$

Le tenseur $\overline{\overline{C'}}$ peut alors s'écrire sous la forme :

$$\overline{\overline{C'}} = \begin{pmatrix} C'_{11} & C'_{12} & C'_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C'_{12} & C'_{11} & C'_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C'_{13} & C'_{13} & C'_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C'_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C'_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C'_{66} \end{pmatrix} \quad (24)$$

Les valeurs des composantes du tenseur pour les 2 orientations sont données dans le Tableau I- 3 pour le silicium :

		ij=11	ij=12	ij=13	ij=33	ij=44	ij=66
100	C_{ij} (GPa)	166,7	63,9	63,9	166,7	79,5	79,5
	S_{ij} (MPa ⁻¹)	$7,62 \cdot 10^{-6}$	$-2,11 \cdot 10^{-6}$	$-2,11 \cdot 10^{-6}$	$7,62 \cdot 10^{-6}$	$1,26 \cdot 10^{-5}$	$1,26 \cdot 10^{-5}$
110	C'_{ij} (GPa)	194,9	35,7	63,9	166,7	79,5	51,4
	S'_{ij} (MPa ⁻¹)	$5,90 \cdot 10^{-6}$	$-3,89 \cdot 10^{-7}$	$-2,11 \cdot 10^{-6}$	$7,62 \cdot 10^{-6}$	$1,26 \cdot 10^{-5}$	$1,95 \cdot 10^{-5}$

Tableau I- 3: Valeurs des C_{ij} et S_{ij} du silicium lorsque les lignes sont orientées [100] et [110].

2.3 Contraintes thermo-élastiques et intrinsèques

Les différentes étapes d'élaboration d'une structure sont susceptibles d'introduire des contraintes résiduelles dans les matériaux. Il est donc utile d'avoir une idée des différentes sources de contraintes présentes. Dans le cas des procédés de la micro-électronique, une grande partie de ces contraintes sont d'origine thermo-élastique (σ^{th}) car la plupart des matériaux sont déposés à des températures élevées (jusqu'à 900°C). La différence de coefficient de dilation thermique avec les autres matériaux présents entraîne des contraintes lors du refroidissement du système. Les autres contraintes seront notées σ^{int} et peuvent être de différentes natures. On a alors :

$$\sigma^{totale} = \sigma^{th} + \sigma^{int} \quad (25)$$

En prenant pour exemple un oxyde de silicium déposé sur du silicium à la température T_{ox} , σ^{th} s'écrit :

$$\sigma_{th} = \frac{E_{ox}}{1 - \nu_{ox}} \int_{T_{ox}}^{T_{amb}} (\alpha_{Si}(T) - \alpha_{Ox}(T)) dT \quad (26)$$

Les contraintes intrinsèques apparaissent lors de la croissance d'un film, que ce soit par dépôt ou par diffusion réactive. Elles peuvent venir du matériau proprement dit ou des étapes subies: densification, conditions de dépôt, etc. En voici quelques exemples :

- ◆ Lors du dépôt d'un matériau sur un substrat rigide, des contraintes intrinsèques s'établissent dans ce matériau. Ces contraintes intrinsèques dépendent généralement de l'épaisseur déposée mais également des conditions de dépôts tel que :
 - La température
 - La pression
 - L'atmosphère (type de gaz)
 - L'énergie des espèces
 - La concentration d'impuretés
 - Le matériau déposé (microstructure, limite élastique...)

Dans le cas des oxydes de silicium, l'utilisation d'un plasma lors des dépôts d'oxyde a une forte influence sur les contraintes intrinsèques. Ce plasma facilite le remplissage des tranchées STI et le bombardement atomique de l'oxyde dû à l'énergie des espèces du plasma entraîne une mise en compression par un phénomène appelé 'atomic peening' [DHe70].

- ◆ Lors d'une diffusion réactive, les contraintes sont introduites par l'apparition d'un nouveau composé avec un volume molaire différent des matériaux présents. La diffusion réactive peut avoir lieu entre deux solides comme lors de la formation de silicures [Riv05], ou entre un solide et un gaz comme pour les oxydes de silicium. Dans d'un oxyde de silicium, l'insertion des atomes d'oxygène entre les atomes de silicium provoque une expansion du volume molaire de 2,25. Le film d'oxyde ainsi formé est en compression dans le plan, puisque le substrat, épais, bloque l'expansion latérale de l'oxyde.
- ◆ Les contraintes intrinsèques peuvent être modifiées pendant les recuits qui suivent le dépôt d'un film car ils entraînent une réorganisation des atomes/molécules [Sta92]. Une densification va généralement entraîner une mise en tension du film suite à sa diminution de taille. Dans le cas d'un oxyde de silicium, les liaisons Si-O-H présentes (suite à l'absorption d'eau par exemple) sont remplacées par des liaisons Si-O-Si qui permettent un réarrangement plus dense de l'oxyde. Cet effet peut toutefois être contrebalancé par l'oxydation du silicium à l'interface Si/oxyde qui provoque une compression. Ces effets dépendent beaucoup de l'atmosphère de recuit, il est donc difficile de calculer ou modéliser l'effet de cette étape.

Que ce soit lors d'un dépôt, d'une diffusion réactive ou d'un recuit, si la température est suffisamment élevée pour que le comportement du matériau devienne viscoélastique ou visqueux, les contraintes vont se relaxer. La Figure I- 11 montre la variation des contraintes dans un oxyde HDP en fonction de la température. On voit que l'évolution des contraintes reste linéaire tant que l'oxyde a un comportement élastique. Lorsque celui-ci devient viscoélastique, les contraintes se relaxent et tendent vers 0. Après relaxation à haute température, la compression devient alors plus importante lors du refroidissement. La compréhension et la simulation de ces différentes étapes et phénomènes dans les technologies du silicium sont discutées dans la référence [Hu91].

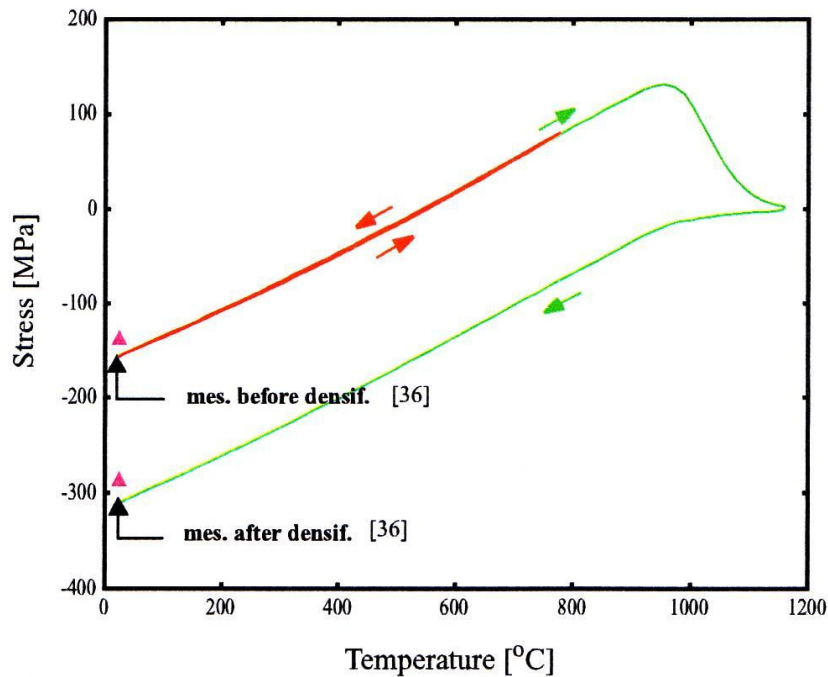


Figure I- 11: Variation de la contrainte dans un oxyde HDP en fonction de la température [Col00].

Des mesures de contraintes intrinsèques par la méthode de la mesure de courbure ont été réalisées lors de ces travaux sur les différents oxydes HDP et recuits du procédé. La méthode de mesure par déflexion d'un faisceau laser ainsi que les résultats sont détaillés dans l'Annexe 1. Les valeurs de contraintes mesurées varient entre -100 MPa et -250 MPa, selon la température de dépôt et le gaz utilisé, ce qui est comparable aux valeurs habituellement observées dans la littérature [Hof00, Til06]. Les recuits après dépôt, à $T = 850^{\circ}\text{C}$ ou moins, n'ont pas eu beaucoup d'influence sur les contraintes. Les recuits à des températures supérieures à 850°C induisent des contraintes plus compressives, ce qui est en accord avec la Figure I- 11.

2.4 Déformation plastique dans le silicium monocristallin

Lorsque l'énergie élastique emmagasinée est trop importante, nous assistons à une déformation irréversible de la structure et à l'apparition de défauts cristallins. Le matériau tend à reprendre la maille qu'il aurait sous forme massif. Le début de la relaxation plastique se manifeste par l'apparition de dislocations. La contrainte à partir de laquelle la déformation plastique sera observée est appelé limite élastique. Dans la pratique, cette valeur est difficile à définir avec précision car elle dépend à la fois de la température et du taux de déformation [Pat63].

Toute dislocation est caractérisée par son vecteur de Burgers \vec{b} et par l'orientation \vec{t} de sa ligne. En fonction de l'angle entre les vecteurs \vec{b} et \vec{t} , on définit le caractère de la dislocation (coin, vis, mixte). Les plans de glissement des dislocations correspondent aux plans denses du matériau. Pour que la dislocation soit stable, \vec{b} doit être le plus petit possible. On forme donc des systèmes [\vec{b} + plan de glissement]. Dans le cas d'une structure cubique face centrée

comme le silicium, \vec{b} vaut $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ et les plans de glissement sont de type $\{111\}$. Il existe ainsi 12 systèmes possibles.

Le silicium est un matériau fragile, sa Température Ductile Fragile (TDF) est de $\sim 600^\circ\text{C}$. La contrainte résolue critique est définie comme la contrainte nécessaire pour déplacer une dislocation isolée dans un plan de glissement [Ler97]. Les valeurs de contraintes critiques sont plus faibles que la limite élastique car elles ne tiennent pas compte de la nucléation des dislocations. C'est pourquoi nous nous sommes intéressés à cette contrainte car dans notre cas, la nucléation des dislocations se fait lors des étapes de fabrication des échantillons et non pas sous l'effet d'une contrainte. En effet, durant le procédé de fabrication des tranchées STI, il existe plusieurs étapes capables de créer des défauts ponctuels sources de dislocations [Rab93, Han00]. Parmi les plus importantes, on pourra noter :

- La gravure des tranchées dans le silicium. Les pentes ne sont pas droites et ne correspondent pas à des plans particuliers. Il y a donc apparition de nombreuses marches dans le silicium qui sont des sites de nucléation facile pour les dislocations.
- L'oxyde thermique à haute température qui va créer des interstitiels dans le Si. Ces interstitiels en sursaturation peuvent générer des boucles de dislocations
- L'implantation ionique qui favorise également l'apparition d'interstitiels.

A température ambiante, les dislocations se déplacent très lentement sous l'effet d'un champ de contrainte. Cependant, à des températures de quelques centaines de degrés Celsius quelques MPa peuvent suffire à faire bouger les dislocations dans les plans de glissement [Geo77, Ler02, Ler97]. Par exemple, lors d'un recuit de 20 minutes à 500°C sur des lignes de silicium de 240 nm de large, une contrainte résolue de 20 MPa dans le silicium suffirait à faire glisser une dislocation sur toute la largeur de la ligne si celle-ci est déjà nucléée.

La simulation de la dynamique des dislocations et la relaxation des contraintes dans le silicium a fait l'objet de nombreuses études [Jai96] pour les procédés d'isolation LOCOS [Van87, Van88, Van90, Hu91, Jai95, Jai95b, Har95, Sen96, Chi02] et STI [Dam98, Tod02, Oha03, Izu05].

En présence d'un champ de contrainte $\vec{\sigma}$, une force appelée force de Peach-Koehler s'exerce sur les dislocations et provoque leur glissement. Elle s'exprime par :

$$\vec{F}_{PK} = (\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) \wedge \vec{t} \quad (27)$$

D'autre part, le vecteur $\vec{\sigma} \cdot \vec{b}$ peut se décomposer en une composante dans le plan de glissement \vec{V}_1 et une composante \vec{V}_2 perpendiculaire au plan de glissement dont l'expression est donnée en équation 29. La force $(\vec{V}_1 \wedge \vec{t})$ entraîne une montée des dislocations alors que la force $(\vec{V}_2 \wedge \vec{t})$ appelé \vec{F}_g entraîne leurs glissements (Equation 30).

$$\vec{V}_2 = (\vec{\sigma} \cdot \vec{b} \cdot \vec{n}) \cdot \vec{n} \quad (28)$$

$$\vec{F}_g = (\vec{\sigma} \cdot \vec{b} \cdot \vec{n}) \cdot (\vec{n} \wedge \vec{t}) \quad (29)$$

On en déduit la contrainte résolue (Resolved Shear Stress) :

$$\sigma_{RSS} = \sigma \cdot \frac{\vec{b}}{b} \cdot \vec{n} \quad (30)$$

A partir de l'expression de la contrainte résolue σ_{RSS} (Equation 30), nous avons calculé la contrainte résolue pour les 12 systèmes $[\vec{b} + \text{plan de glissement}]$ du silicium dans les repères $([100],[010],[001])$ et $([110],[-110],[001])$. Ces repères sont les deux repères qui ont été étudiés dans ces travaux car ils correspondent aux deux repères possibles pour les échantillons. Les calculs sont détaillés dans l'Annexe 2. Nous avons ainsi calculé la contrainte résolue qui s'applique sur les plans de glissement du silicium.

Ainsi, les valeurs possibles pour σ_{RSS} dans le repère $([100],[010],[001])$ sont $\frac{-\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{\sqrt{6}}$,

$\frac{\sigma_{xx} - \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$, $\frac{-\sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$. Pour le repère $([110],[-110],[001])$, les valeurs possibles sont 0,

$\frac{\sigma_{xx} - \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$ et $\frac{-\sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$.

Nous avons présenté dans ce paragraphe les bases de la mécanique nécessaires à la compréhension des études qui font suite à ce chapitre, notamment l'effet de l'anisotropie du silicium sur les contraintes qui a été étudié par modélisation mécanique (paragraphe I-3.4) puis expérimentalement (paragraphe IV-5.1). Nous avons également introduit la notion de contrainte résolue qui est la contrainte qui s'applique sur les plans de glissement et qui peut entraîner le mouvement de dislocations.

3. Les éléments finis pour l'analyse des déformations et des contraintes

Pour calculer les champs de déformation et de contrainte, nous avons utilisé la modélisation par éléments finis. Dans le cadre de cette étude, cette technique permet de donner une approximation des déplacements, des déformations et des contraintes dans une structure soumise à une sollicitation mécanique, comme un gradient de température par exemple. La résolution de l'équation de Navier-Lamé (Equation 31) permet d'obtenir les déplacements dans un solide.

$$(\lambda + \mu) \cdot \nabla \text{div} \vec{u} + \mu \cdot \text{div}(\nabla \vec{u}) + \vec{f} = \vec{0} \quad (31)$$

Avec λ et μ les coefficients de Lamé, \vec{u} le déplacement et \vec{f} les forces s'appliquant sur le système.

Cependant sa résolution pour des conditions aux limites données nécessite la plupart du temps une résolution numérique. Les éléments finis constituent une technique de résolution d'équations différentielles par discrétisation. Si la méthode a dans un premier temps été développée pour la mécanique [Bat96, Zie77], elle est aujourd'hui utilisée dans de nombreux domaines tels que la thermique [Ber04] ou l'électromagnétisme [Cou81]. La simulation par éléments finis est beaucoup employée depuis les années 80 dans la microélectronique [Sau90, Gre91, Wei96, Gou98, Ste99, Hof00, Igi00, Wol03, Loub03], son succès vient de sa facilité d'utilisation. De nombreux logiciels ont été développés et sont devenus de plus en plus ergonomiques et performants avec les progrès des processeurs de calcul.

Le principe général consiste à subdiviser la surface ou le volume à analyser en éléments de forme géométrique simple, interconnectés par des 'nœuds'. L'ensemble des éléments et nœuds, formant la structure à étudier, est appelé maillage et permet la discrétisation du problème. En effet, le problème du milieu continu est donc transformé en un ensemble de problèmes discrets avec un nombre fini de paramètres inconnus, dans notre cas : les déplacements. Le principe détaillé et les équations sont exposés avec précision dans la référence [Mou06, chapitre 12].

Cette technique a depuis longtemps été appliquée à des problèmes de la microélectronique, notamment pour les procédés d'isolation LOCOS [Pon85, Kob90, Wol92, Van96, Sen96, Rue99, Dem00] et plus récemment sur les procédés STI [Par96, Kur98, Pon98, Rue99, Hof00, Cac06]

Une autre approche consiste à calculer les déformations à partir de modèles analytiques [Hu89, Hu90, Hu92] mais elle est limitée à des structures simples.

3.1 Le logiciel FEMLAB

Afin de modéliser les contraintes dans un réseau de lignes de silicium isolées par des tranchées STI nous avons utilisé le logiciel FEMLAB 2.3 [Com02] qui est un environnement de modélisation régi par des équations aux dérivées partielles, interne à MATLAB [Mat02] avec un maillage automatique de la géométrie en triangles (pour la modélisation en deux dimensions), ou en tétraèdres (modélisation en trois dimensions). Notre choix s'est porté sur ce logiciel en raison de certaines de ses caractéristiques [Lou06] :

- ◆ FEMLAB possède une interface graphique ergonomique très rapide à mettre en oeuvre.
- ◆ Le langage de programmation de FEMLAB est basé sur celui de MATLAB, ce qui nous permet d'inclure directement le code FEMLAB dans notre logiciel de simulation de cartographie de l'espace réciproque développé sous MATLAB (cf. chapitre 3).

Notons que la dernière version a été renommée COMSOL Multiphysics 3.2 et ne nécessite plus l'environnement MATLAB.

Contrairement aux logiciels habituellement utilisés dans l'industrie, tel que ISE [Sen07] FEMLAB ne modélise pas la diffusion ou la consommation de matériau (comme lors d'une oxydation thermique). ISE est un logiciel plus complet mais également plus complexe d'utilisation. Les calculs sont beaucoup plus longs à cause de la discrétisation du procédé et

ne convergent pas toujours à cause du remaillage de la structure à chaque changement de géométrie.

Dans le cadre de cette étude, seules les interactions mécaniques entre les matériaux sont prises en compte. La contrainte interne est modélisée en assignant des coefficients de dilatation thermique α^i aux différents matériaux. Un gradient de température $\Delta T = (T - T_{ref})$ est alors appliqué au système, de telle sorte que le chargement thermique dans le matériau i par rapport au matériau j soit défini par $(\alpha^i - \alpha^j)\Delta T$. Ainsi, l'état initial entré dans FEMLAB est un état de référence à la température T_{ref} dans lequel les contraintes dans la structure sont nulles. Le système évolue ensuite sous l'action d'une variation thermique vers son état d'équilibre en fonction des conditions aux limites imposées.

3.2 Simulation d'un réseau de lignes

Nous avons simulé des lignes de silicium isolées par des tranchées remplies d'oxyde de silicium et de longueur infinie dans la direction y . Cette dernière hypothèse permet de réaliser une modélisation en deux dimensions et ainsi de se placer dans un cas de déformations planes ($\epsilon_{yy} = 0$). Cette structure a été choisie car elle est géométriquement proche des produits de type mémoire tout en restant assez simple à définir.

Nous appliquons comme conditions aux limites un déplacement nul suivant la direction x sur les bords latéraux (pour le substrat et l'oxyde dans les tranchées), et un déplacement nul suivant les directions x et z pour la partie inférieure du substrat. Ces conditions ont été validées comme étant équivalentes à des conditions limites périodiques [Lou06]. La Figure I-12 représente schématiquement une période du système ainsi que les conditions aux limites.

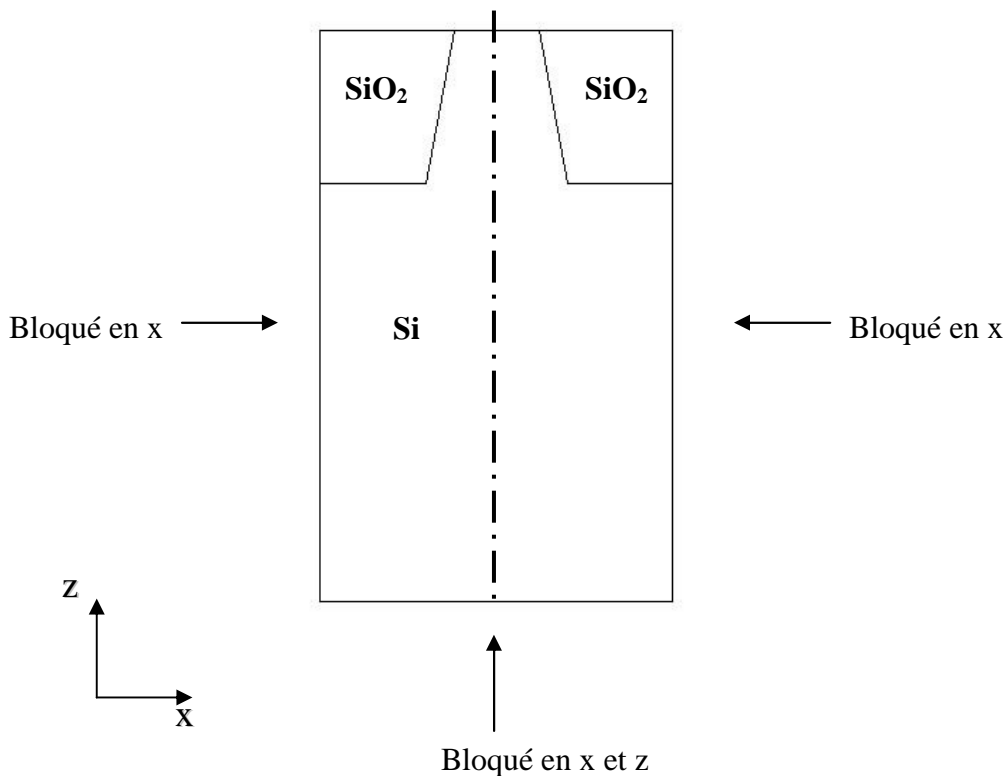


Figure I- 12: Schéma d'une période de la structure et des conditions aux limites appliquées.

Les déplacements suivant la direction x sont également nuls au milieu de la structure car il s'agit d'un axe de symétrie (Figure I- 12, ligne en pointillé). Cette symétrie rendrait possible la simulation d'une demi-période à la place d'une période entière. En effet, en tout point (x,z) du système, $u_i(x,z) = u_i(-x,z)$ avec $i = x,z$ et r le déplacement suivant la direction i . Dans un souci de lisibilité, la structure sera toujours représentée sous forme d'une période entière.

Le maillage constitue une étape importante avant de calculer le champ de déplacement. La structure est généralement maillée avec 5000 à 10000 éléments triangulaires. Le maillage doit être d'autant plus précis (éléments petits) que les variations de déplacement sont grandes. Dans notre cas, il est resserré dans la ligne de silicium et plus particulièrement près des interfaces avec l'oxyde de silicium. Un exemple de maillage de la structure est donné en Figure I- 13.

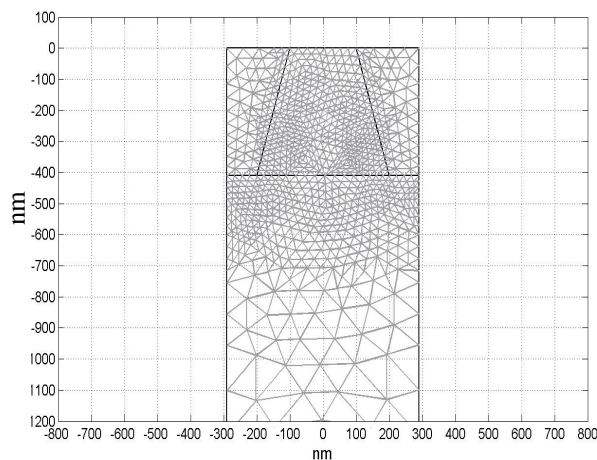


Figure I- 13: Exemple de maillage de la structure étudiée.

Il est maintenant possible de calculer le champ de déplacement et donc les déformations et les contraintes dans l'ensemble du système pour un ΔT donné. Dans la pratique, le coefficient de dilatation thermique du substrat a été fixé à zéro et sa valeur réelle est directement soustraite des autres matériaux présents dans le système. Le résultat est donné sur la Figure I- 14 pour les déformations suivant la direction x et un ΔT de 1000°C . Les valeurs de E , ν , α et C_{ij} utilisées dans les calculs pour les différents matériaux ont été données dans les tableaux I- 1, I- 2 et I- 3.

Qualitativement, la différence de coefficient de dilatation entre le silicium et l'oxyde ($\alpha_{\text{Si}} > \alpha_{\text{SiO}_2}$) entraîne des déformations négatives ou contraction suivant la direction x et des déformations positives (dilatation) suivant la direction z (non visible sur la figure) dans la ligne de silicium. Inversement mais dans une moindre mesure, les déformations sont positives suivant x et négatives suivant z dans l'oxyde de remplissage.

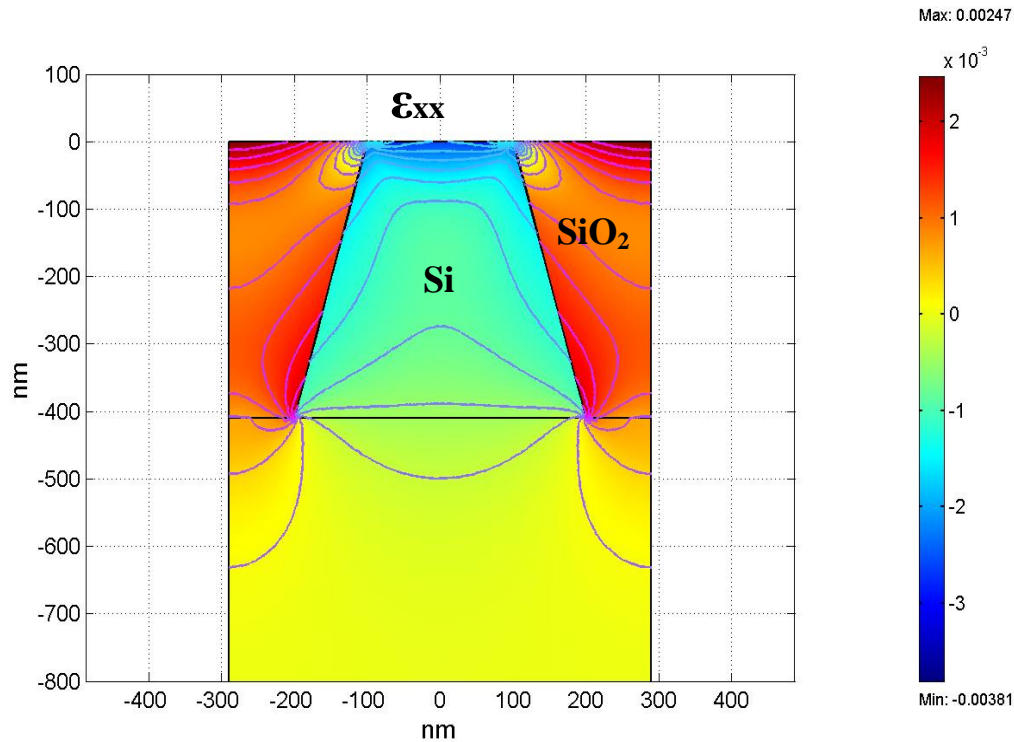


Figure I- 14: Champ de déformation ϵ_{xx} dans une période d'un réseau de lignes de silicium déformées par l'oxyde de remplissage des tranchées STI pour un $\Delta T = 1000^\circ\text{C}$. $p=580\text{nm}$, $b=200\text{nm}$, $h=410\text{nm}$.

3.3 Effet de bord dans un réseau de lignes

En simulant une seule période avec des conditions aux limites périodiques, on considère que le réseau est infini suivant la direction x . Les réseaux sur lesquels nous avons travaillé avaient une taille de 2 mm, ce qui correspond à ~ 3450 périodes de $0,58\mu\text{m}$ et 10000 périodes de 200 nm. Dans ce paragraphe, nous avons évalué le nombre de périodes nécessaires pour obtenir un système considéré comme infini. Pour cela, nous avons répété plusieurs fois la géométrie de la Figure I- 14 et nous avons calculé les déformations sur l'ensemble de la géométrie en modifiant les conditions aux limites. La condition à la limite latérale (déplacement nul suivant x) a été supprimée dans l'oxyde de remplissage pour simuler le bord de l'échantillon. Nous avons ensuite comparé les déformations dans la ligne de silicium se situant au milieu de la structure contenant plusieurs périodes. La Figure I- 15 montre une comparaison des profils de déformations en fonction de la profondeur au centre de l'active pour $x=0$ dans des structures avec un nombre de période variable. Le but est de voir à partir de combien de périodes la simulation est stable et donc le réseau considéré comme infini.

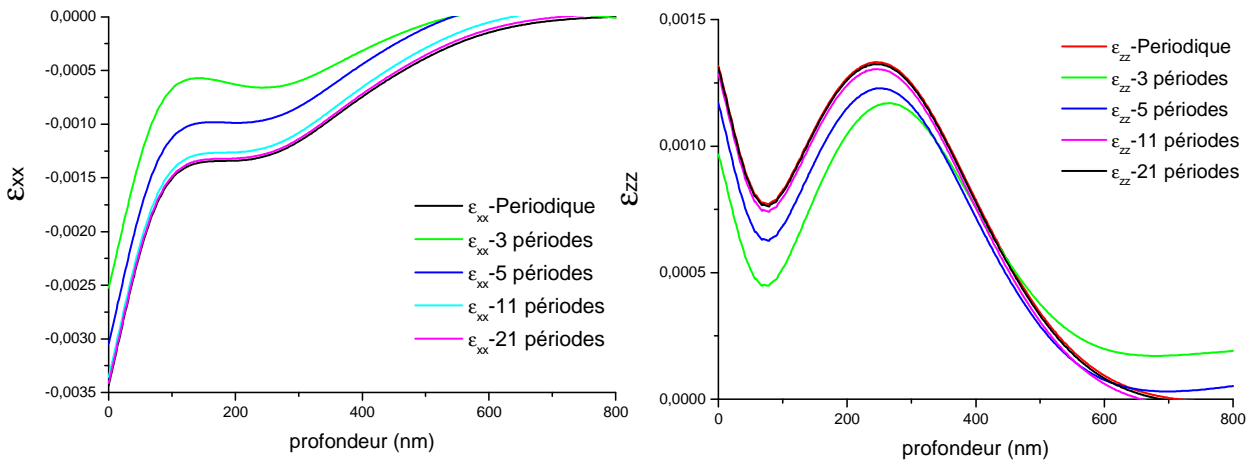


Figure I- 15: Comparaison des profils de déformations simulés pour des structures avec un nombre de période variable.

On voit qu'à partir de 10 périodes, le profil de déformations est déjà quasi-identique au profil de déformations correspondant aux conditions aux limites périodiques (bordures latérales bloquées). Au-delà de 20 périodes, les courbes se superposent. Pour toutes les périodes étudiées, le nombre de périodes constituant l'échantillon est largement supérieur à 20. On peut donc sans problème considérer les échantillons comme des réseaux infinis.

3.4 Effet de l'anisotropie du silicium sur les déformations

Comme nous l'avons vu dans le chapitre I-2, le silicium est un matériau cubique et anisotrope ($A=1,6$). Afin d'observer l'effet de son anisotropie sur les déformations, nous avons comparé les profils des déformations en fonction de la profondeur au milieu de l'active de silicium pour des réseaux géométriquement identiques mais avec des orientations cristallographiques différentes. Dans le réseau 1, les lignes sont orientées suivant la direction [100], pour le réseau 2 elles sont orientées [110]. Enfin dans le dernier réseau le silicium est considéré comme isotrope. Les profils des déformations, calculés suivant les directions x et z, sont donnés dans la Figure I- 16. Les calculs ont été effectués avec la même géométrie que celle de la Figure I- 14 et avec un chargement thermique $\Delta T=1000^{\circ}\text{C}$.

On remarque sur ces graphiques que les déformations au milieu de l'active varient légèrement suivant que les lignes sont orientées [100], [110] ou encore avec du silicium isotrope. Cet effet est légèrement plus marqué sur les déformations suivant l'axe z que suivant l'axe x. Le silicium est globalement plus déformé lorsque les lignes sont orientées [100] et moins déformé si elles sont orientées [110]. Lorsque le silicium est considéré comme isotrope, les valeurs de déformations sont incluses entre les 2 cas anisotropes mais sont très proches de l'orientation [110].

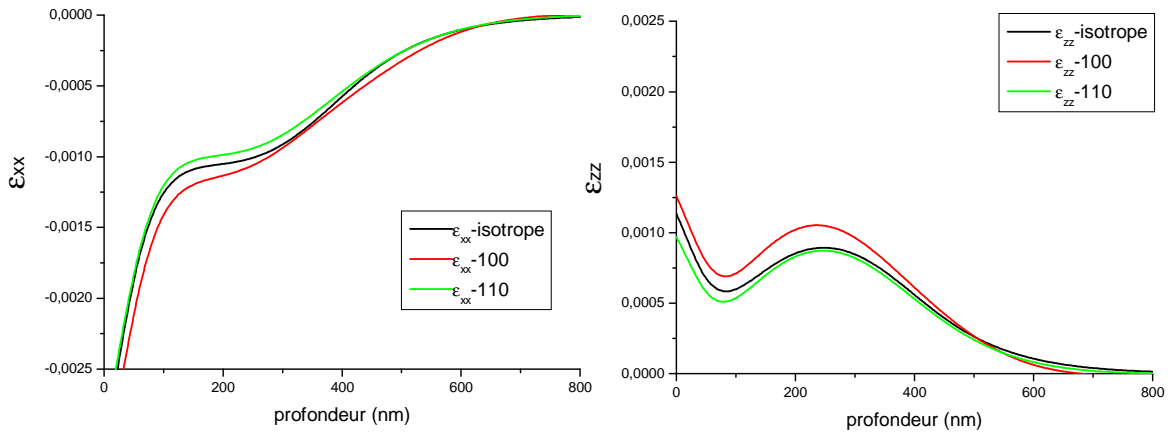


Figure I- 16: Déformation suivant x (gauche) et suivant z (droite) au milieu de l’active en fonction de l’orientation des lignes de Si. $p=580\text{nm}$, $b=200\text{nm}$, $h=410\text{nm}$.

On voit que les différences entre les deux orientations possibles des lignes de silicium du réseau ne sont pas négligeables. Ce facteur a donc été pris en compte dans les calculs Femlab pour les différentes études qui suivent.

3.5 Comparaison d’un modèle composite aux simulations FEMLAB

Dans ce paragraphe, nous allons comparer le champ de déformation calculé avec FEMLAB à un modèle composite ‘analytique’. Pour cela, les valeurs moyennes des contraintes dans la ligne de silicium obtenues par les 2 méthodes seront comparées. Ce modèle composite a été développé pour des lignes de cuivre de type damascène et est décrit en détail dans la référence [Fre03]. Le principe consiste à considérer des lignes étroites ($h, p \gg b$) déposées sur substrat et isolées par de l’oxyde. Le modèle prédit alors une homogénéisation des déformations et des contraintes dans la ligne. Dans ce cas ‘limite’, on peut écrire des équilibres mécaniques entre les déformations et contraintes moyennes dans la ligne, l’oxyde et le substrat lors d’une variation de température ΔT . Nous avons appliqué ce modèle aux réseaux de tranchées STI remplis d’oxyde de silicium. Dans le cas présent, les lignes et le substrat sont tous deux en silicium et l’oxyde de silicium remplit les espaces entre les lignes (détail de la géométrie et des dimensions sur la Figure I- 17). Dans ces conditions on peut écrire un système de 6 équations à 6 inconnues (Equations 32 à 37).

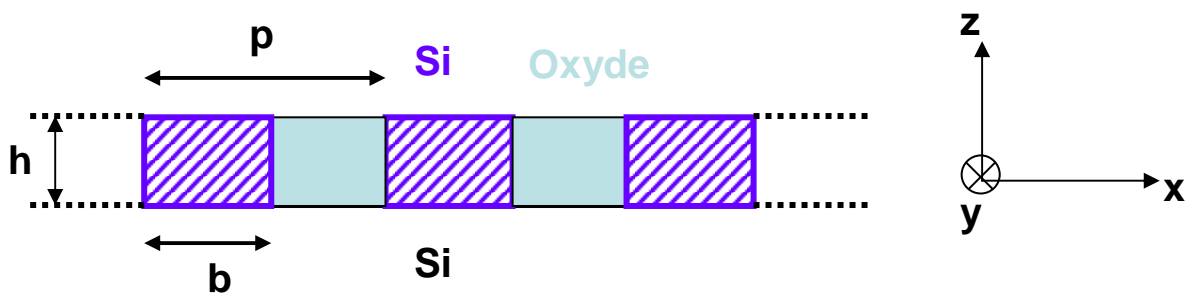


Figure I- 17: Description de la structure du modèle composite pour des lignes de Si. p est la période et b la largeur des lignes de Si.

$$\langle \varepsilon_y^{Si} \rangle = 0 \quad (32)$$

$$\langle \varepsilon_y^{ox} \rangle = (\alpha_{Si} - \alpha_{ox}) \Delta T \quad (33)$$

$$(p-b) \langle \varepsilon_x^{ox} \rangle + b \langle \varepsilon_x^{Si} \rangle = (p-b)(\alpha_{Si} - \alpha_{ox}) \Delta T \quad (34)$$

$$\langle \sigma_x^{Si} \rangle = \langle \sigma_x^{ox} \rangle \quad (35)$$

$$\frac{b}{p} \langle \sigma_z^{Si} \rangle + \frac{p-b}{p} \langle \sigma_z^{ox} \rangle = 0 \quad (36)$$

$$\langle \varepsilon_z^{Si} \rangle + \alpha_{Si} \Delta T = \langle \varepsilon_z^{ox} \rangle + \alpha_{ox} \Delta T \quad (37)$$

Chaque équation a une signification physique par rapport aux conditions du système. Par exemple, l'équation (32) traduit la condition de déformations planes. L'équation (33) provient de la différence de coefficient de dilatation entre l'oxyde et le silicium. L'équation (34) traduit la même condition mais suivant la direction x et pondéré par les dimensions du système suivant cette même direction. Le terme $(p-b)(\alpha_{Si} - \alpha_{ox})\Delta T$ provient de la différence de coefficient de dilatation thermique entre la ligne d'oxyde et le substrat de silicium qui se trouve dessous. Ce terme doit être alors compensé par les déformations dans la ligne d'oxyde et la ligne de silicium. L'équation (35) traduit l'équilibre mécanique le long des « murs » des tranchées. Les forces qui s'appliquent à l'interface silicium – oxyde doivent être égales et de signe opposées, ce qui signifie bien que l'oxyde et le silicium sont dans le même état de contrainte suivant la direction x. L'équation (36) décrit la nullité de la contrainte moyenne σ_z dans la structure. Enfin l'équation (37) décrit la continuité des déplacements suivant z à l'interface silicium – oxyde (voir [Fre03], p. 210 pour plus de détails).

Les équations 32, 33, 34, 35, 36 et 37 forment ainsi un système de 6 équations à 6 inconnues. Les 6 inconnues sont σ_x^{Si} , σ_y^{Si} , σ_z^{Si} , σ_x^{ox} , σ_y^{ox} et σ_z^{ox} . Les déformations correspondantes étant liées aux contraintes par le tenseur de Hooke décrit précédemment (Equation 7). On obtient la relation matricielle suivante (équation 38) :

$$\begin{pmatrix} S_{12}^{Si} & S_{11}^{Si} & S_{13}^{Si} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{12}^{ox} & S_{11}^{ox} & S_{12}^{ox} \\ bS_{11}^{Si} & bS_{12}^{Si} & bS_{13}^{Si} & (p-b)S_{11}^{ox} & (p-b)S_{12}^{ox} & (p-b)S_{12}^{ox} \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b/p & 0 & 0 & (p-b)/p \\ S_{13}^{Si} & S_{13}^{Si} & S_{33}^{Si} & -S_{12}^{ox} & -S_{12}^{ox} & -S_{11}^{ox} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x^{Si} \\ \sigma_y^{Si} \\ \sigma_z^{Si} \\ \sigma_x^{ox} \\ \sigma_y^{ox} \\ \sigma_z^{ox} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ (\alpha_{Si} - \alpha_{SOx})\Delta T \\ (p-b)(\alpha_{Si} - \alpha_{SOx})\Delta T \\ 0 \\ 0 \\ -(\alpha_{Si} - \alpha_{SOx})\Delta T \end{pmatrix} \quad (38)$$

La résolution du système avec $b=300$ nm et $p=1000$ nm donne les valeurs de contraintes pour l'oxyde et le silicium rassemblées dans le Tableau I- 4:

Contraintes (MPa)	σ_x^{Si}	σ_y^{Si}	σ_z^{Si}	σ_x^{Ox}	σ_y^{Ox}	σ_z^{Ox}
Anisotrope ligne [100]	-242,4	16,4	301,7	-242,4	-314,3	-129,3
Anisotrope ligne [110]	-255,0	96,1	315,7	-255,0	-318,1	-135,3

Tableau I- 4: Valeurs ‘limites’ de contraintes dans le silicium et l’oxyde de silicium avec le modèle composite pour un chargement thermique de 1000°C.

La première observation est que lorsque les lignes de silicium sont orientées [110], les contraintes sont toutes plus élevées, que ce soit dans les lignes de silicium ou d’oxyde. Ensuite, les valeurs de contraintes varient peu dans l’oxyde avec l’orientation des lignes de silicium. L’écart maximum est pour la contrainte σ_x^{Ox} et vaut moins de 15 MPa. L’oxyde étant isotrope, ces variations sont dues aux différences de contraintes dans le silicium. Pour les lignes de silicium, les variations en fonction de l’orientation sont beaucoup plus importantes, sauf pour σ_x^{Si} où l’écart est le même que dans l’oxyde car $\sigma_x^{Si} = \sigma_x^{Ox}$ (Equation 35). L’écart de contrainte d’une orientation à l’autre est le plus visible pour σ_y^{Si} avec un écart de 80 MPa. Dans le cas des lignes [100], les contraintes suivant la direction y sont presque nulles. Lorsque les lignes sont orientées [110], les contraintes suivant y sont donc plus élevées de 80 MPa mais restent plus faibles (en valeur absolue) que suivant les autres directions.

Le logiciel FEMLAB permet l’intégration des contraintes sur une aire, on peut ainsi calculer les contraintes moyennes dans l’ensemble de la ligne de Si et d’oxyde. Ces valeurs moyennes de contraintes ont été calculées suivant les 3 directions x, y et z pour des valeurs de $\frac{h}{b}$ croissantes. Elles ont été ensuite comparées graphiquement aux valeurs limites obtenues avec le modèle composite données dans le Tableau I- 4. Les Figures I-18, I-19 et I-20 représentent respectivement les contraintes suivant les directions x, y et z dans l’oxyde et dans les lignes de silicium lorsque celle-ci sont orientées [100] et [110].

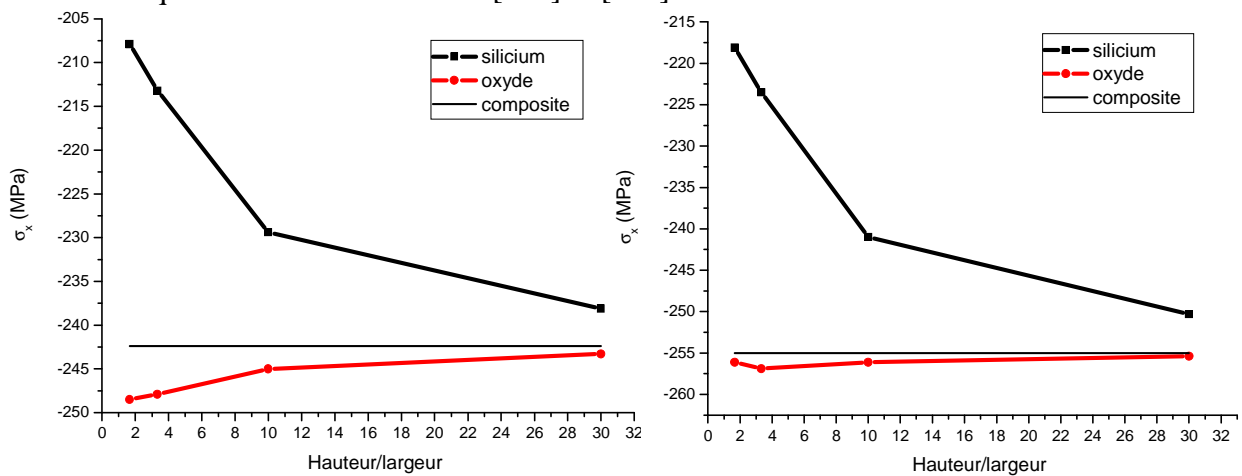


Figure I- 18: Contraintes moyennes suivant la direction x dans la ligne de silicium et l’oxyde pour des valeurs h/b croissantes. Comparaison avec la valeur du modèle composite pour une orientation [100] (gauche) et [110] (droite) des lignes.

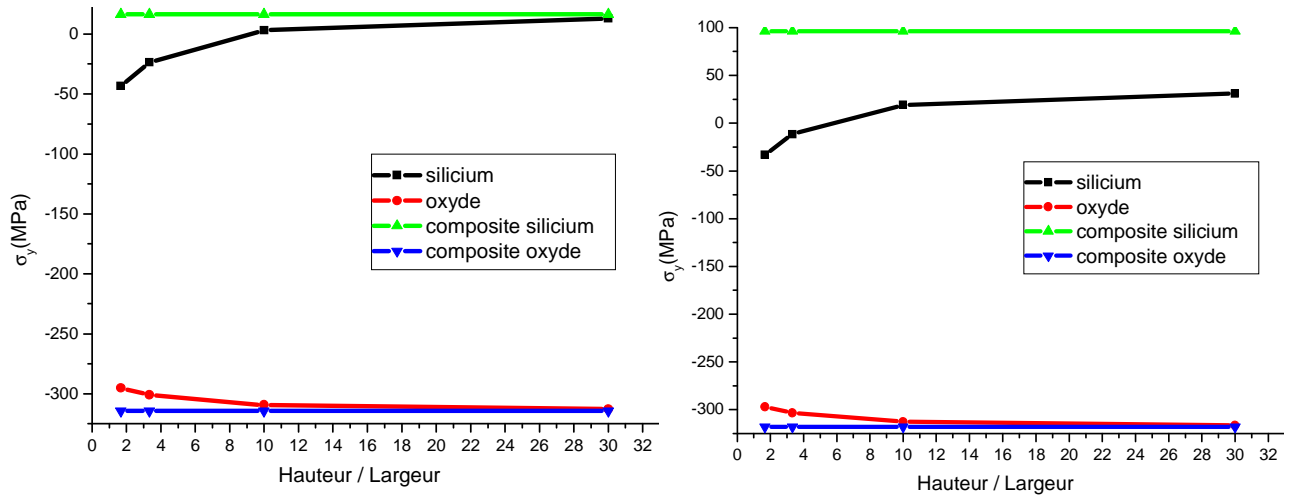


Figure I- 19: Contraintes moyennes suivant la direction y dans la ligne de silicium et l'oxyde pour des valeurs h/b croissantes. Comparaison avec les valeurs du modèle composite pour une orientation [100] (gauche) et [110] (droite) des lignes.

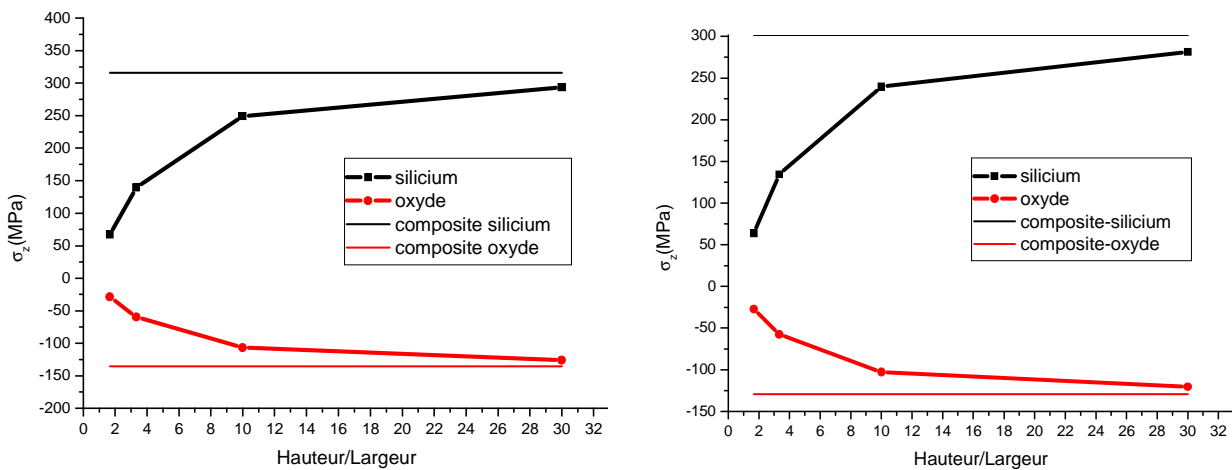


Figure I- 20: Contraintes moyennes suivant la direction z dans la ligne de silicium et l'oxyde pour des valeurs h/b croissantes. Comparaison avec les valeurs du modèle composite pour une orientation [100] (gauche) et [110] (droite) des lignes.

Les Figures ci-dessus montrent toutes la même tendance générale. Suivant les 3 directions x, y et z et pour les deux orientations de lignes [100] et [110], les contraintes moyennes calculées avec FEMLAB dans le silicium et l'oxyde tendent vers la valeur obtenue avec le modèle composite lorsqu'on augmente le rapport hauteur/largeur. Ce résultat est en accord avec le modèle composite qui prédit une homogénéisation des contraintes dans le cas d'une ligne étroite, donc avec un rapport h/b élevé. Dans le cas de lignes de cuivre damascène (structures pour lesquelles le modèle a été développé), les valeurs de contraintes du modèle composite étaient atteintes pour des rapports h/b plus faibles [Fre03], cependant la tendance est bien la même. On n'observe pas de différences de comportement dans les valeurs de contraintes moyennes calculées avec FEMLAB pour les deux orientations de lignes, excepté pour σ_y^{Si} avec des lignes orientées [110]. Les valeurs de contraintes calculées avec FEMLAB semblent tendre vers une valeur limite plus faible que la valeur du modèle composite.

Les calculs avec FEMLAB et avec le modèle composite sont donc en accord. Ils nous ont permis de valider les champs de contraintes (et donc de déformation) dans un cas limite pour 2 orientations du réseau. Cela montre aussi que les contraintes ont tendance à s'homogénéiser dans une ligne de silicium. Même si dans le cas réel le rapport h/b n'est pas aussi élevé, cette homogénéisation des contraintes doit se faire progressivement. L'étude paramétrique qui suit nous permettra de localiser un peu mieux l'apparition de cette homogénéisation des déformations.

3.6 Etude par éléments finis de l'influence des dimensions des tranchées STI sur les contraintes

Nous allons étudier dans ce paragraphe l'influence de paramètres géométriques sur le champ de déformation dans les lignes de silicium isolées par des STI. Les 3 paramètres étudiés sont la largeur des lignes b (Figure I- 21), la profondeur des tranchées h (Figure I- 22) et la période p (Figure I- 23). ΔT a été fixé à 1000°C pour toute cette étude.

◆ Effet de la largeur des lignes

Pour l'étude de la largeur des lignes, les valeurs de h et p ont été respectivement fixées à 410 nm et 580 nm. Sur la Figure I- 21, on observe que lorsque b diminue, la déformation dans l'ensemble de la ligne augmente. Les déformations provenant de la différence de coefficient de dilatation thermique avec l'oxyde de remplissage, la diminution de la taille de la ligne entraîne nécessairement une augmentation des déformations. En effet, la quantité d'oxyde qui exerce une force sur le silicium devient plus importante avec la diminution de la taille de l'active de silicium. Ce qui est plus singulier, c'est qu'à une profondeur de $\sim 200\text{nm}$, il se forme une zone où les déformations varient peu. Suivant la direction x , la déformation reste quasi-stable.

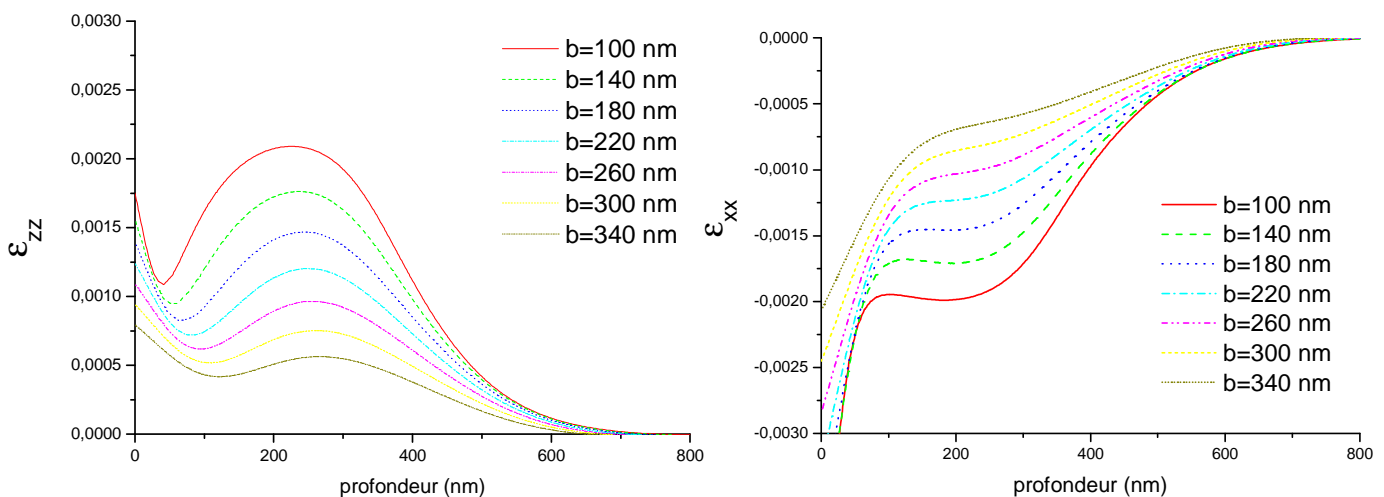


Figure I- 21: Variation de ϵ_{zz} (gauche) et de ϵ_{xx} (droite) au milieu de la ligne de silicium en fonction de la profondeur pour différentes valeurs de b . $h=410$ nm, $p=580$ nm.

◆ Effet de la hauteur des lignes

L'effet de la hauteur des tranchées h est similaire, excepté que l'homogénéisation des déformations intervient lorsque h augmente. Pour cette étude, b a été fixé à 200 nm et p à 580 nm. Sur la Figure I- 22, on voit que pour $h=200$ nm, les déformations diminuent régulièrement avec la profondeur et ne forment pas de paliers. Pour des valeurs de h plus grandes, les déformations augmentent, forment un maximum suivant la direction z vers le milieu de la ligne et un plateau suivant la direction x qui est d'autant plus marqué que h est grand.

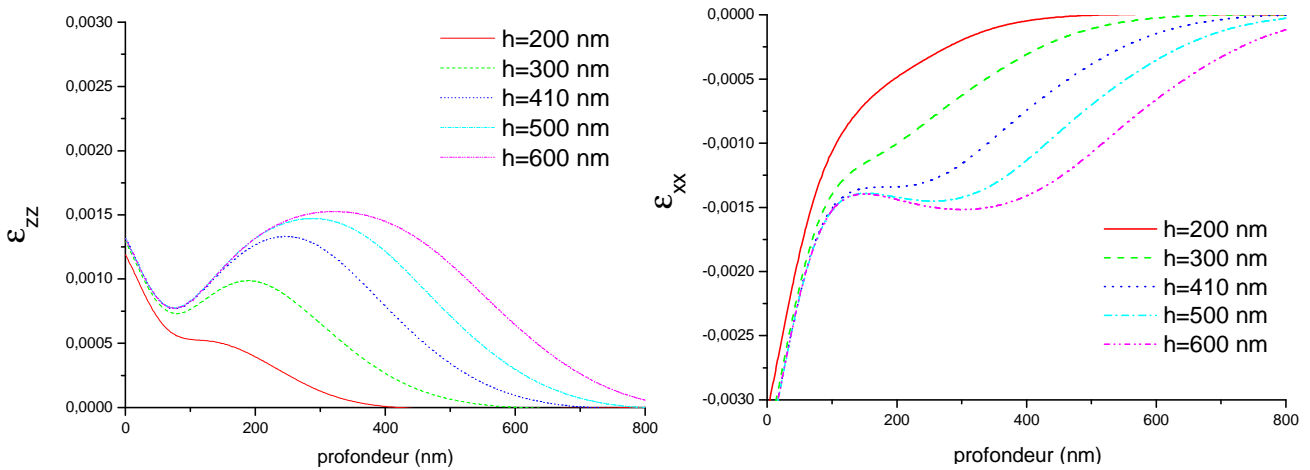


Figure I- 22: Variation de ϵ_{zz} (gauche) et de ϵ_{xx} (droite) au milieu de la ligne de silicium en fonction de la profondeur pour différentes valeurs de h . $b=200$ nm, $p=580$ nm.

◆ Effet de la période

Pour l'étude sur p , les valeurs de h , b et p ont été initialement prises égales à 410 nm, 200 nm et 580 nm comme pour les autres études, puis la valeur de p a été multipliée et divisée plusieurs fois en conservant le rapport b/p constant. Par exemple, pour $p=290$ nm, b a été fixé à 100 nm, h restant constant tout au long de l'étude. Quand la période p varie, l'effet sur les déformations est plus visible (Figure I- 23). Pour $p>1000$ nm, les déformations diminuent progressivement avec la profondeur dans toute la ligne. En deçà de cette valeur, une zone homogène commence à apparaître. A partir de $p=145$ nm, on atteint cependant une limite et on remarque que les déformations diminuent linéairement entre 60nm et 400nm de profondeur. Cette diminution est liée à la pente des lignes de silicium.

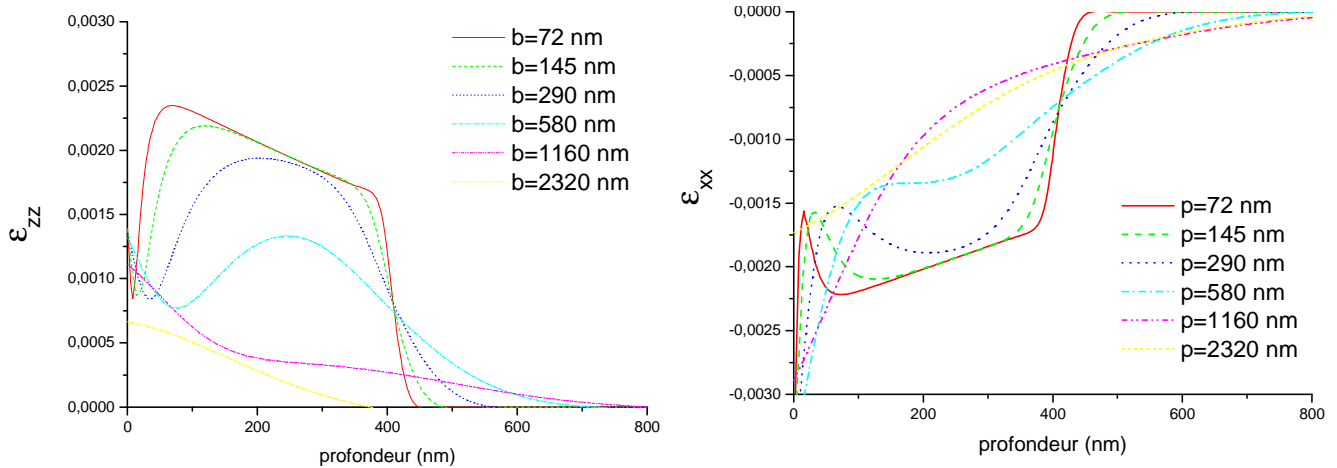


Figure I- 23: Variation de ϵ_{zz} (gauche) et de ϵ_{xx} (droite) au milieu de la ligne de silicium en fonction de la profondeur pour différentes valeurs de p. b varie avec p pour garder b/p constant, h=410 nm.

Même si les effets de b, h et p sont différents, on remarque une tendance générale. Lorsque les déformations augmentent, elles tendent à s'homogénéiser au sein de la ligne de silicium. Cela intervient quand b et p diminuent et lorsque h augmente. Cet effet est en accord avec le modèle composite étudié précédemment dans ce chapitre. En effet, la diminution de b et p avec une hauteur de tranchée constante signifie que le rapport h/b augmente. Il en est de même lorsque h augmente avec b et p constant.

Quelles que soient les simulations entreprises, il est possible d'exporter l'ensemble des informations calculées dans le logiciel MATLAB, dont FEMLAB fait partie. On peut alors traiter les données (champ de déplacement, de déformations, etc.) avec les outils de programmation de MATLAB. Cette utilisation des données obtenues avec FEMLAB sera détaillée dans le chapitre III.

◆ Evolution de la contrainte résolue

A partir des déformations, la contrainte résolue a été calculée pour une période de 580 nm avec un chargement thermique de 1000°C. Le résultat est donné en

Figure I- 24. On voit sur la figure que la contrainte résolue est maximale dans les coins supérieurs de la ligne de silicium, comme il a déjà été observé expérimentalement dans [Bur04]. Cela se comprend car c'est à cette hauteur que la ligne est la plus étroite, mais surtout, elle présente une singularité géométrique en son bord. On voit également que les contraintes varient peu au centre de la ligne, tout comme cela a été vu pour les déformations.

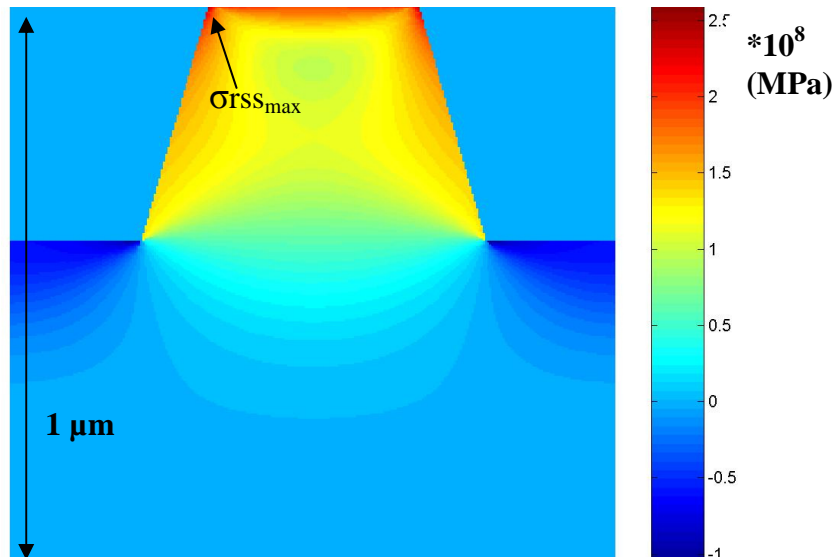


Figure I- 24: Valeurs de la contrainte résolue dans le silicium ($p=580$ nm) sur une profondeur de $1 \mu\text{m}$ avec un chargement thermique de 1000°C (Contrainte non calculée dans l'oxyde).

Dans la suite, nous donnerons les variations des valeurs de contraintes résolues en fonction du chargement thermique ΔT (Figure I- 25), de la largeur des lignes et de la période (Figure I- 26). Dans chaque cas, la contrainte résolue est donnée au centre de la ligne (au niveau de la zone homogène) et au niveau des coins supérieurs, là où elle est maximale. Cependant comme cette dernière position est située au voisinage d'une singularité géométrique, le calcul de la contrainte a tendance à diverger et à donner des valeurs très élevées. Le résultat dépend alors fortement du maillage de Femlab. D'autre part, dans la réalité, une telle singularité n'existe pas car les coins des lignes sont arrondis lors des différentes oxydations. C'est pourquoi les valeurs de $\sigma_{\text{rss-max}}$ ont été prises en se décalant de 10 nm en x et en z du coin supérieur de la ligne.

La Figure I- 25 montre la variation de la contrainte résolue en fonction du chargement thermique. On voit que cette variation est parfaitement linéaire avec la température, que ce soit au centre de la ligne de silicium ou lorsque la contrainte est maximale. Le rapport entre $\sigma_{\text{rss(centre)}}$ et $\sigma_{\text{rss(max)}}$ est constant et vaut environ $1,5$. On pourra donc avoir un ordre de grandeur de la contrainte résolue en bord de ligne à partir sa valeur au centre.

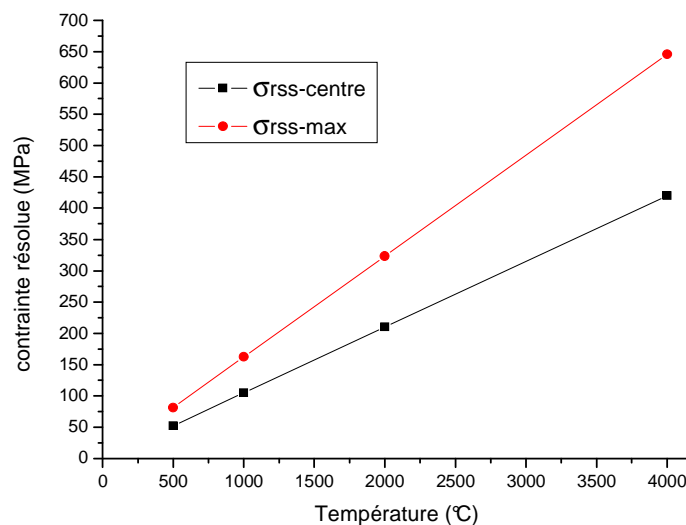


Figure I- 25: Variation de $\sigma_{\text{rss}} - \text{centre}$ et $\sigma_{\text{rss}} - \text{max}$ en fonction de ΔT . $p=580$ nm, $b=200$ nm et $h=410$ nm.

Le graphique de gauche de la Figure I- 26 montre la variation de la contrainte résolue avec la largeur de ligne (b) pour $p=580$ nm. On voit que la variation de la contrainte résolue maximale et au centre de la ligne entre $b=340$ nm et $b=140$ nm est linéaire. Dans ce cas $\sigma_{\text{rss}}(\text{max})$ n'est plus proportionnelle à $\sigma_{\text{rss}}(\text{centre})$. Par contre, $\sigma_{\text{rss}}(\text{max})$ reste environ 50 MPa plus élevée que $\sigma_{\text{rss}}(\text{centre})$ sur la gamme de b étudiée.

L'influence de la période p (Figure I- 26, droite) est différente de l'influence de b . Dans un premier temps, la diminution de la taille de la période entraîne globalement une augmentation de la contrainte résolue maximale et au centre de la ligne. Cependant, la différence entre les deux tend à diminuer avec la diminution de période. Pour $p=145$ nm et en dessous, la valeur de $\sigma_{\text{rss}}(\text{max})$ n'est plus très représentative car les contraintes diminuent trop rapidement près des coins supérieurs et la valeur maximale se situe plutôt au milieu de la ligne (suivant x) dans la partie supérieure de la ligne. Dans ces conditions $\sigma_{\text{rss}}(\text{max})$ n'est plus comparable avec les valeurs déterminées pour les périodes plus grandes (290 nm et 580 nm). Pour $p=145$ nm et $p=72$ nm, les contraintes s'homogénéisent sur l'ensemble de la ligne, c'est pourquoi $\sigma_{\text{rss}}(\text{centre})$ commence à se stabiliser pour $p=72$ nm. Cette observation est en accord avec le modèle composite décrit dans le paragraphe 3.5. qui prédit une homogénéisation des contraintes avec l'augmentation du rapport h/b (b diminue avec p et comme la valeur de h est fixe, le rapport h/b augmente).

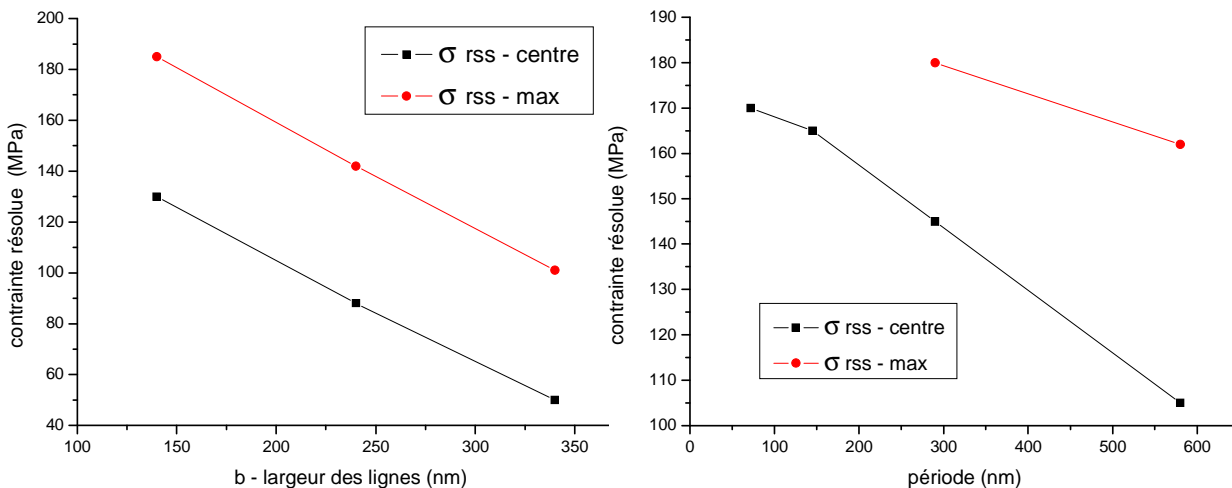


Figure I- 26: Variation de $\sigma_{\text{rss}} - \text{centre}$ et $\sigma_{\text{rss}} - \text{max}$ en fonction de b pour $p=580$ nm (gauche) et en fonction de p en gardant le rapport b/p constant (droite). $h=410$ nm, $\Delta T=1000^\circ\text{C}$.

Jusqu'à présent, seul le remplissage était considéré dans la structure étudiée et le haut de la ligne de silicium n'était pas recouvert. Nous avons donc calculé la contrainte résolue dans les cas où la ligne est recouverte d'un liner ou d'un liner avec du poly-silicium. Les résultats du Tableau I- 5 montrent que lorsque la ligne de silicium est recouverte, les contraintes résolues maximales diminuent. La différence par rapport à $\sigma_{\text{rss}}(\text{centre})$ devient plus faible, d'autant plus que la valeur au centre devient légèrement plus grande à cause des contraintes induites par le liner. Dans le cas de structures plus complexes, on se rend donc compte qu'il n'y a plus beaucoup de différence entre les contraintes au centre et maximales, même si celles-ci sont toujours situées dans les coins supérieurs de la ligne.

	Sans liner Sans poly-Si	Avec liner Sans Poly-Si	Avec liner Avec poly-Si
$\sigma_{\text{rss}} - \text{centre}$ (MPa)	105	115	120
$\sigma_{\text{rss}} - \text{max}$ (MPa)	162	155	144

Tableau I- 5: Valeurs de la contrainte résolue au centre de la ligne et maximale pour différentes couches déposées.

En résumé :

En conclusion de cette étude, nous avons vu que la contrainte résolue était maximale dans les coins supérieurs de la ligne et qu'elle variait peu au centre. Les contraintes varient linéairement avec la température appliquée à la structure et également en fonction de la largeur de lignes (entre 140 et 340 nm). La diminution de période, quant à elle, entraîne une augmentation de la contrainte résolue. Cependant, la contrainte tend à s'homogénéiser, la différence entre $\sigma_{\text{rss}}(\text{centre})$ et $\sigma_{\text{rss}}(\text{max})$ diminue avec p et la valeur au centre semble tendre vers une valeur limite ce qui est en accord avec le modèle composite. Pour des structures plus complexes, les contraintes résolues maximales diminuent dans les coins rendant l'écart entre $\sigma_{\text{rss}}(\text{centre})$ et $\sigma_{\text{rss}}(\text{max})$ très faible.

3.7 Comparaison des profils de déformations FEMLAB et ISE

Lors de ces travaux, nous avons eu l'opportunité de comparer les modélisations faites sur le logiciel Femlab avec d'autres obtenues avec le logiciel ISE en comparant des profils de déformations calculées. Le fonctionnement d'ISE diffère légèrement de celui de Femlab car il tient compte de toutes les étapes du procédé avec un maillage de la structure à chaque changement de géométrie. Son fonctionnement est brièvement décrit ci-dessous.

Ce logiciel comprend un module "process" nommé Sentauros Process, dédié à la modélisation chronologique de chaque étape aboutissant à un dispositif électronique. Les simulations de contraintes sous Sentauros Process se déroulent en quatre étapes distinctes :

- ◆ Les équations de la mécanique sont définies. Sentauros Process utilise les équations qui définissent l'équilibre dans le régime quasi statique.
- ◆ Les conditions aux limites sont définies
- ◆ Sentauros Process prend en compte les propriétés des matériaux. De façon générale, il utilise les modèles visqueux, élastique, et viscoélastique. Le modèle élastique peut tenir compte de l'anisotropie du matériau : les coefficients d'élasticité dépendront alors de l'orientation du cristal (tout comme dans Femlab).
- ◆ Sentauros Process prend en compte les mécanismes générateurs de contrainte : contraintes intrinsèques d'un dépôt ou par diffusion réactive, différence de coefficient

de dilatation thermique (en tenant compte de la dépendance en température de ces coefficients), différence de paramètre de maille lors des oxydations ou encore les densifications.

Ce logiciel est donc plus complet que Femlab mais également plus complexe d'utilisation. Les calculs sont beaucoup plus longs à cause de la discrétisation du procédé qui nécessite une description des différentes étapes technologiques. Cela entraîne un remaillage à chaque changement de géométrie qui ne converge pas toujours (ce qui était le cas pour le procédé des échantillons de période 200 nm). De plus, il n'a pas été possible d'obtenir les déplacements en fin de calcul, ce qui est nécessaire au calcul des cartographies de l'espace réciproque.

Les profils de déformation obtenus par Femlab et ISE ont donc été comparés pour plusieurs coupes suivant les directions x et z (Figure I- 27 et Figure I- 28).

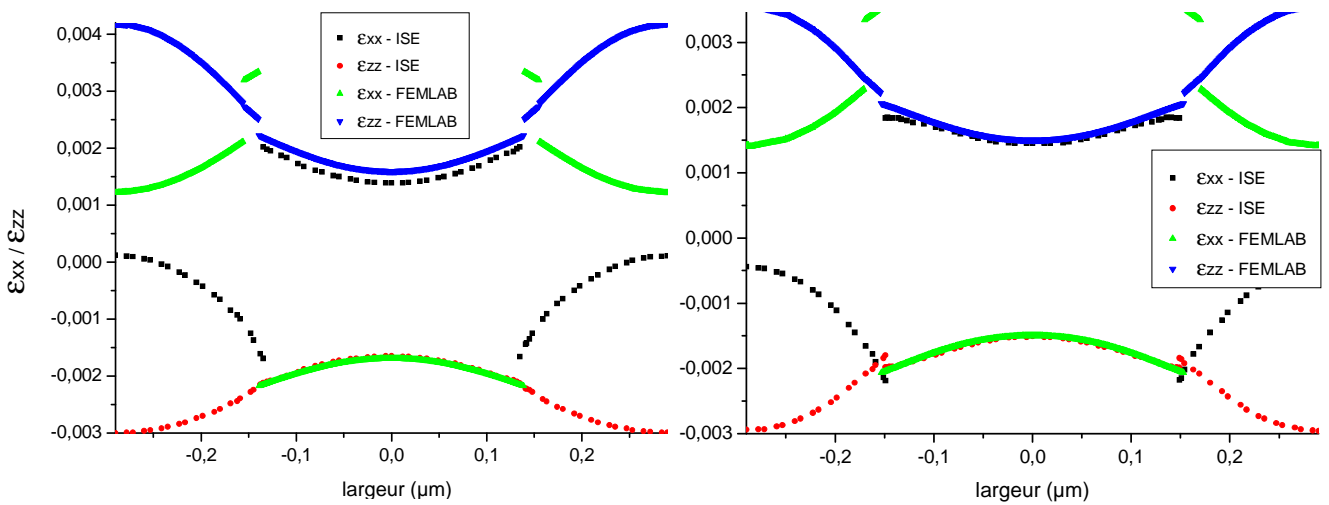


Figure I- 27: Déformations suivant x et z selon des coupes horizontales de la structure à une profondeur de 200 nm (gauche) et 300 nm (droite).

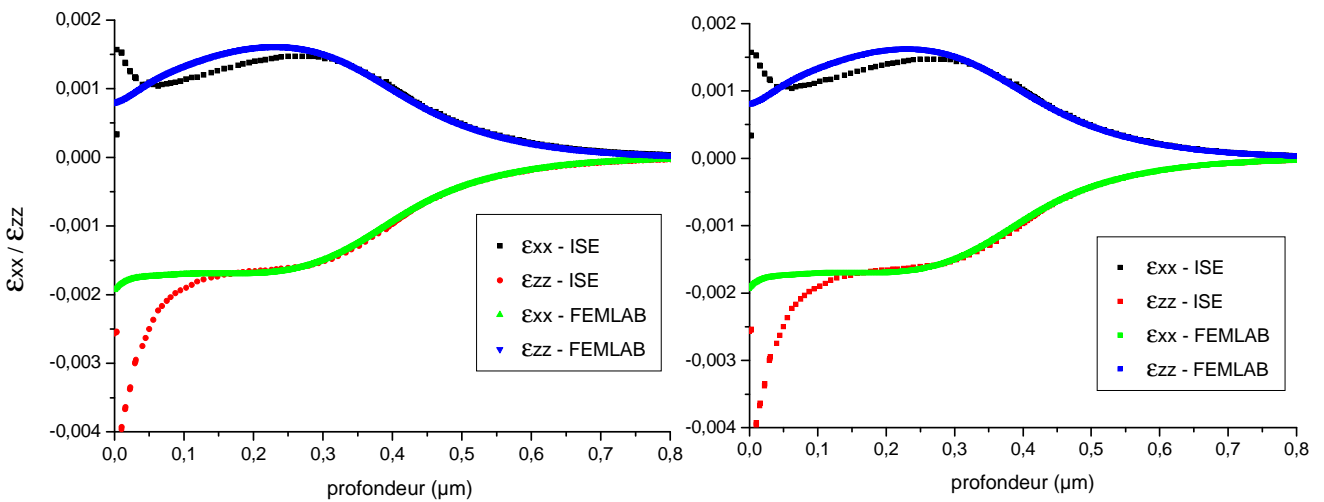


Figure I- 28: Déformations suivant x et z selon des coupes verticales de la structure pour $x = 10$ nm (gauche) et $x = 90$ nm (droite). Le centre de la ligne étant $x = 0$ nm.

On observe de fortes similitudes entre les profils obtenus sous ISE et ceux obtenus avec Femlab. Sur les coupes horizontales, plus précisément la partie centrale des courbes, il y a un très bon accord Femlab / ISE. Cette zone correspond à la zone active et on observe des déformations quasi-identiques au centre. En dehors de l'active de silicium, c'est à dire dans l'oxyde SiO_2 , on note de fortes disparités. En réalité ces différences sont dues au référentiel des déformations qui n'est pas le même pour les deux logiciels. En effet, Femlab se réfère systématiquement au silicium pour calculer les déformations. Pour les coupes verticales on a là aussi des résultats proches. Les différences se situent principalement dans la partie supérieure de la ligne pour les déformations dans la direction z.

Dans la mesure où l'approche ISE tient compte des étapes du procédé telles que les oxydations thermiques, il est probable que les déformations calculées près des interfaces Silicium/Oxyde soit mieux traitées par le logiciel. Il n'a malheureusement pas été possible de calculer des cartographies du réseau réciproque à partir d'ISE.

Conclusion

Dans ce chapitre nous avons décrit le procédé de fabrication des tranchées STI. Pour cela nous avons détaillé les étapes 'clés' intervenant dans le procédé puis nous avons également vu les deux variantes de la fabrication des tranchées STI : Le STI standard (STI-Std) et le Self Aligned STI (SA-STI). Dans le procédé STI-Std, la définition des actives de silicium est faite en premier. L'oxyde de grille ainsi que d'autres étapes sont donc fabriquées sur des structures déjà gravées. Dans le SA-STI, l'oxyde de grille est formé avant la gravure. Le poly-silicium est gravé en même temps que le silicium, il est donc aligné avec le silicium. Enfin, nous avons détaillé les variables du procédé avec les paramètres susceptibles de changer entre les différents échantillons étudiés dans ce chapitre et les chapitres suivants.

Nous avons ensuite présenté quelques notions et notations usuelles dans le cadre de la théorie de l'élasticité linéaire. Ces bases sont nécessaires à la compréhension des études qui font suite à ce chapitre, notamment l'effet de l'anisotropie du silicium sur les contraintes qui a été étudié par modélisation mécanique en troisième partie de ce chapitre et expérimentalement (paragraphe IV-5.1). Nous avons aussi introduit la notion de contraintes résolues qui sont les contraintes qui s'appliquent sur les plans de glissement et qui peuvent entraîner le glissement des dislocations.

Enfin nous avons utilisé la modélisation par éléments finis pour l'analyse des déformations et des contraintes. Nous avons expliqué le principe général de cette méthode et le fonctionnement du logiciel Femlab qui a été employé pour ces simulations. Nous avons ensuite étudié l'effet de l'orientation des lignes de silicium. Les résultats ont montré que les lignes orientées [100] sont plus déformées que les lignes orientées [110]. L'effet de la largeur des lignes (b), la hauteur des tranchées (h) et de la période (p) des échantillons a été simulé individuellement. Même si les effets de b , h et p sont différents, on remarque une tendance générale. Lorsque les déformations augmentent, elles tendent à s'homogénéiser au sein de la ligne de silicium. Cela intervient quand b et p diminuent et lorsque h augmente. Cet effet est en accord avec le modèle composite développé dans cette partie du chapitre. En effet, ce modèle prédit une homogénéisation des contraintes et des déformations lorsque les lignes sont étroites, c'est-à-dire quand le rapport h/b est élevé. Nous avons également vu que la contrainte résolue variait linéairement avec la variation de température appliquée à la structure et également en fonction de la largeur de lignes (entre 140 nm à 340 nm). La diminution de période, quant à elle, entraîne une augmentation de la contrainte résolue. Cependant, la contrainte tend à s'homogénéiser, la différence entre $\sigma_{\text{rss}}(\text{centre})$ et $\sigma_{\text{rss}}(\text{max})$ diminue avec p et la valeur au centre semble tendre vers une valeur limite ce qui est également en accord avec le modèle composite.

Références :

- [App70] J.A. Appels, E. Kooi, M.M. Paffen, J.J.H. Schatorje, W.H.C.G. Verkuylen, Philips Res. Rept. 25, 118 (1970)
- [App71] J.A. Appels, M.M. Paffen, Philips Res. Rept. 26, 157 (1971)
- [Bat96] K. J. Bathe, Prentice-Hall, Pearson, 1996
- [Bea92] N. Beaumont, J.M. Diani, L. Penazzi, Introduction au Comportement des Matériaux et à sa Modélisation, Ed. ENSTA, 1992
- [Ber04] J. M. Bergeau, R. Fortunier, Hèrmes, Paris, 2004
- [Bra73] W.A. Brantley, J. Appl. Phys. 44(1) (1973)
- [Bry94] A. Bryant, W. Hansch and T. Mii, 'Characteristics of CMOS Device Isolation for the ULSI Age', IEDM Tech. Dig., 671 (1994)
- [Bur04] N. Burbure, K.S. Jones, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 810, C4-19-1 (2004)
- [Cac06] F. Cacho, S. Orain, G. Cailletaud, H. Jaouen, Microelec. Reliab. 47 (2-3), 161 (2007)
- [Chi02] D. Chimdambarao, X.H. Liu, K.W. Schwarz, J. Appl. Phys. 92(10), 6278 (2002)
- [Cho06] D. Choi, E.P. Kwon, H. Lee, J. Chang, K. Choi, J. Villasenor, IEEE, 295 (2006)
- [Col00] P. Colpani, G. Carlotti, V. Senez, 1st report on Physical Characterization of Samples for Stress Measurement, IST-STREAM project, 2000.
- [Cou81] J. L. Coulomb, Thèse d'état de l'INP Grenoble, 1981
- [Dam98] J. Damiano et al. 'Characterisation and Elimination of Trench Dislocations', Symp. On VLSI Tech., 212 (1998)
- [Dem00] J. Demarest, R. Hull, K.T. Schonenberg, K.G.F. Janssens, Appl. Phys. Lett. 77, 412 (200)
- [DHe70] F.M. d'Heurle, Metal. Trans. 1, 725 (1970)
- [Dou96] L. Doucet, 'Caractérisation Mécanique et Physico-Chimique des Matériaux Métalliques et Diélectrique dans les Structures d'Interconnexions destinés à la Micro-Electronique, Thèse de doctorat, INPG, 1996
- [Ele93] M. Eleana, M. Bonelli, C.E. Bottani, G. Ghislotti, A. Miotello, P. Mutti, P.M. Ossi, Thin Solid Films 236, 236 (1993)
- [Faz93] P.C. Fazan and V.K. Mathews, 'A highly Manufacturable Trench Isolation Process for Deep Submicron DRAMs', IEDM Tech. Dig., 57 (1993)
- [Fem02] Femlab 2.3, www.comsol.com/, 2002.
- [Fre03] L. B. Freund, S. Suresh, Cambridge University Press, Cambridge, 2003
- [Geo77] Armand George, 'Etude par topographie aux rayons X de la vitesse de glissement des dislocations dans le silicium', Thèse de l'Institut National Polytechnique de Lorraine (1977)
- [Gou98] A. Gouldstone, et al., J. Mater. Res. 13 (7) (1998)
- [Gre91] B. Greenbaum, et al., Appl. Phys. Lett 58 (17) (1991)

- [Han00] 'Handbook of Semiconductors Technology : El. Struct. and Prop. of Semic.', K.A. Jackson, W. Schröter, Wiley-VCH (2000)
- [Har95] A.H. Harker, K. Pinardi, A. Atkinson, S.C. Jain, *Philos. Mag. A* 71, 871 (1995)
- [Hof00] T. Hoffmann, 'Modelisation et simulation multidimensionnelle des contraintes mécaniques en technologie silicium avancées', Thèse de IEMN et de l'USTL, 2000
- [Hof00] T. Hoffmann, et al., *MSM* 2000, 59-62 (2000)
- [Hu89] S.M. Hu, *J. Appl. Phys.*, 66, 2741 (1989)
- [Hu90] S.M. Hu, *J. Appl. Phys.* 67, 1092 (1990)
- [Hu91] S.M. Hu, *J. Appl. Phys.* 70 (6) R53 (1991)
- [Hu92] S.M. Hu, D. Chidambarrao, *Appl. Phys. Lett.* 61, 783 (1992)
- [Igi00] P. M. Igić and P. A. Mawby, *Proc. 22nd International Conference on Microelectronics* 1, 347 (2000)
- [INS88] *Properties of Silicon*, INSPEC, The Gresman Press, Surrey (England) 1988
- [Izu05] S. Izumia, T. Miyakeb, S. Sakaia, H. Ohtac, *Mat. Sc. and Eng. A* 395, 62 (2005)
- [Jac07] S. Jacob, B. De Salvo, G. Festes, S. Bodnar, R. Coppard, J-F Thiery, T. Pate-Cazal, L. Perniola, E. Jalaguier, T. Pedron, F. Boulanger, S. Deleonibus, *ESSDERC proceeding*, 410 (2007)
- [Jac66] R.J. Jaccodine, W.A. Schlegel, *J. Appl. Phys.* 37(6), 2429 (1966)
- [Jai95] S.C. Jain, A.H. Harker, A. Atkinson, K. Pinardi, *J. Appl. Phys.* 78, 1630 (1995)
- [Jai95b] S.C. Jain, B. Dietrich, H. Richter, A. Atkinson, A.H. Harker, *Phys. Rev. B* 52, 6247 (1995)
- [Jai96] S.C. Jain, H.E. Maes, K. Pinardi, I. De Wolf, *J. Appl. Phys.* 79 (11), 8145 (1996)
- [Kob90] K. Kobayashi, Y. Inoue, T. Nishimura, M. Hirayama, Y. Akasaka, T. Kato, *J. Electrochem. Soc.* 137, 1987 (1990)
- [Koo71] E. Kooi, J.G. van Lierop, W.H.C.G. Verkuylen, R. de Werdt, *Philips Res. Rept.* 26, 166 (1971)
- [Kur98] T. Kuroi, *IEDM Dig.*, 141 (1998)
- [Lan86] L.D. Landau, E.M. Lifschitz, *Theory of Elasticity*, Pergamon Press, New York, 1986
- [Ler02] B. Leroy, Tutorial 'Défauts cristallins dans les structures submicroniques en silicium', CREMSI (2002)
- [Ler97] B. Leroy, *Solid State Phenomena*, 57-58, 275 (1997)
- [Leu93] G.J. Leusink, T.G.M. Oosterlaken, G.C.A.M. Janssen, S. Radelaar, *J. Appl. Phys.* 74, 3899 (1993)
- [Lou03] A. Loubens, R. Fortunier, R. Fillit, O. Thomas, *Microelec. Eng.* 70 (2-4) 455 (2003)
- [Lou06] A. Loubens, 'Champ de déformation induit dans un monocristal par un réseau de dimensions submicroniques : diffraction des rayons X en mode haute résolution et simulation par éléments finis', Thèse de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne et de l'Université Jean Monnet de Saint-Etienne (2006).

- [Mae95] K. Maex, M. VanMossum, A. Reader, 'Properties of Metal Silicides', K. Maex and M. VanMossum Eds., IMEC, Belgique, 1995
- [Mai60] L. Maissel, J. Appl. Phys. 50(7), 211 (1960)
- [Mat02] Matlab 6.5, www.mathworks.fr/, 2002
- [Mou06] M. Mouis, Hermes Science Publications, Paris, 2006
- [Mul04] G. Muller, T. Happ, M. Kund, G. Y. Lee, N. Nagel, R. Sezi, 'Status and outlook of emerging nonvolatile memory technologies', IEDM Tech. Dig., 567–570 (2004)
- [Nye57] J.F. Nye, Physical Properties of Crystals, O.U.P London, 1957
- [Oha03] T. Ohashi, M. Sato, T. Maruizumi, I. Kitagawa, Appl. Surf. Sc. 216, 340 (2003)
- [Ott04] F. Ottogalli, A. Pirovano, F. Pellizzer, M. Tosi, P. Zuliani, P. Bonetalli, R. Bez, IEEE, 293 (2004)
- [Par96] T. Park, Y.G. Shin, H.S. Lee, M.H. Park, S.D. Kwon, H.K. Kang, Y.B. Koh, M.Y. Lee, IEDM, 747 (1996)
- [Pat63] J.R. Patel, A.R. Chaudri, J. Appl. Phys. 34, 2788 (1963)
- [Pon85] A. Poncet et al., Finite Element Simulation of Local Oxidation of Silicon, IEEE Transactions on Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems, 1985
- [Pon98] A. Poncet et al., ESSDERC Proc., 120 (1998)
- [Pri05] B. Prince, 'Trends in scaled and nanotechnology memories', in Non-Volatile Memory Technology Symposium, 55-61 (2005)
- [Rab93] J. Rabier, A. George, Y. Bréchet and L. Kubin, Solid State Phenomena Vol. 35-36, Scitec, 1994
- [Riv05] Christian Rivero, 'Contraintes induites par les procédés de la microélectronique : développement des contraintes lors des réactions Co-Si et Ni-Si', Thèse de l'Université Paul Cézanne (2005)
- [Rue99] H. Rueda, 'Modeling of Mechanical Stress in Silicon Isolation Technology and its influence on Device Characteristics', PhD dissertation, Univ. of Florida, 45, (1999)
- [Sal97] Sallagoity, 'Etude et réalisation de structures avancées d'isolement par tranchées peu profondes pour technologies CMOS 0,25 μm = Investigation on a shallow trench isolation process for sub-quarter micron CMOS technologies', Thèse de l'Université de Grenoble 1 (1997)
- [Sau90] A. I. Sauter and W. D. Nix, Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 188 (1990)
- [Sch04] R. van Schaijk, M. van Duuren, P. Goarin, W.Y. Mei, K. van der Jeugd, IEEE, 277 (2004)
- [Sen01] V. Senez, T. Hoffmann, E. Robilliart, G. Bouche, H. Jaouen, M. Lunenborg, G. Carnevale, IEDM 01-831, IEEE 2001
- [Sen03] V. Senez, A. Armigliato, I. De Wolf, G. Carnevale, R. Balboni, S. Frabboni, A. Benedetti, J. Appl. 94(9), 5574 (2003)
- [Sen07] Sentaurus Process, Synopsys, v. z-2007.03, http://www.synopsys.com/products/tcad/sentaurus_procs_ds.html

- [Sen96] V. Senez, D. Collar, P. Ferreira, B. Bacchus, IEEE Trans. On Electr. Devices 43-5, 720 (1996)
- [Shi99] C.-S. Shin, D. Gall, P. Desjardins, Appl. Phys. Lett. 75(24), 3808 (1999)
- [Sta92] M. Stadtmueller, J. Electrochem. Soc. 139(12), 3669 (1992)
- [Ste99] A. Steegen, et al., J. Appl. Phys. 86 (8) (1999)
- [Til06] A.T. Tilke, C. Stapelmann, M. Culmsee, R. Conti, W. Wille, R. Jaiswal, M. Galiano, A. Jain, ASMC (2006)
- [Tim70] S.P. Timshenko, J.N. Goodier, Theory of Elasticity 3rd ed., Mc Graw Hill, New York, 1970
- [Tod02] A. Toda, N. Ikarashi, H. Ono, Appl. Phys. Lett. 80(13), 2278 (2002)
- [Uch93] T. Uchida, N. Kotani, K. Kobayashi, Y. Mashiko, N. Tsubouchi, IEDM Tech. Dig., 315 (1993)
- [Van87] J. Vanhellemont, S. Amelinckx, C. Claeys, J. Appl. Phys. 61, 2170 (1987)
- [Van88] J. Vanhellemont, C. Claeys, J. Appl. Phys. 63, 5703 (1988)
- [Van90] J. Vanhellemont, PhD Dissertation, Universiteit Antwerpen, Belgium (1990)
- [Van96] J. Vanhellemont, K.G.F. Janssens, S. Frabboni, P. Smeys, R. Balboni, A. Armigliato, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 406, 479 (1996)
- [Wei96] K. Weide, et al., Microelectron. Reliab. 36 (11/12), 1703 (1996)
- [Wol03] I. D. Wolf, et al., Microelectronic Engineering 70, 425 (2003)
- [Wol92] I. De Wolf, J. Vanhellemont, A. Romano-Rodriguez, H. Norstrom, H.E. Maes, J. Appl. Phys. 71, 898 (1992)
- [Zie77] O. Zienkiewicz, R. Taylor, Mc Graw-Hill, Kingscourt, 1977

CHAPITRE II

Description des méthodes de détermination des déformations mécaniques locales

Comme il a été vu dans le chapitre précédent, les champs de déformation peuvent être calculés en employant la modélisation par éléments finis. Nous allons présenter ici les principales techniques de mesures de déformations locales qui peuvent s'appliquer à des problématiques de la micro-électronique. Elles ont été classées en 3 catégories : les méthodes optiques, les méthodes électroniques et les méthodes de diffraction de rayons X. On pourra ainsi par la suite comparer les simulations théoriques à des données expérimentales et en déduire avec précision le comportement des contraintes mécaniques en fonction du choix et des variations de procédé technologique.

1. Méthodes Optiques

Les méthodes optiques présentées dans ce chapitre utilisent toutes la diffusion Raman mais sous différentes formes. Les premières méthodes, la spectroscopie Raman et Micro-Raman, consistent à analyser directement la réponse du matériau en champ lointain alors que la technique du nano-Raman, encore en plein développement, permet de s'affranchir de la limite de résolution liée à la lumière excitatrice par couplage avec un microscope à force atomique (AFM).

1.1 Raman / Micro Raman

La diffusion Raman a été mise en évidence par Sir Raman en 1928 [Ram28] mais le principe avait été envisagé théoriquement quelques années plus tôt en 1923 par A. Smekal [Sme23]. Le phénomène physique intervenant en spectrométrie Raman est la diffusion inélastique d'une radiation monochromatique par une substance donnée. Il donne lieu à l'émission d'un rayonnement Stokes et d'un rayonnement anti-Stokes, décalés symétriquement par rapport à la longueur d'onde de la lumière excitatrice. La source utilisée est le plus souvent un laser, pour sa monochromaticité et son intensité.

Une installation classique de spectrométrie Raman comprend (Figure II- 2) :

- Une source laser dont le faisceau est focalisé sur l'échantillon
- Une platine porte-échantillon
- Une optique de collection de la lumière diffusée (microscope)
- Un spectromètre
- Un détecteur de rayonnement très sensible (CCD)
- Une électronique d'acquisition et de traitement des données spectrales

Le spectre fait apparaître des raies correspondant aux modes de vibration propres de la matière analysée. Ces raies sont caractérisées par leurs fréquences en cm^{-1} (relativement à la raie excitatrice), leurs intensités et leurs largeurs (Figure II- 1). Par exemple, pour le Si non contraint, la fréquence de la raie la plus intense est de 521cm^{-1} . Sur la Figure II- 1, on peut également voir une raie plasma. En effet, à côté de la raie du silicium qui est utilisée comme longueur d'onde excitatrice, une multitude de raies peu intenses, appelées raies « plasma », sont émises par le laser. Cette lumière est simplement réfléchiée par l'échantillon, et apparaît sur le spectre enregistré. Il est possible de couper ces raies plasma à l'aide d'un monochromateur placé juste après le laser. Il est cependant judicieux de conserver ces raies comme références de fréquence pour corriger le spectre en cas de dérive du signal.

Il est intéressant de noter que la profondeur de pénétration dépend de la longueur d'onde λ . On pourra donc analyser une épaisseur allant de 10 nm (pour $\lambda=363\text{nm}$) à 10 μm (pour $\lambda=800\text{nm}$) pour le silicium.

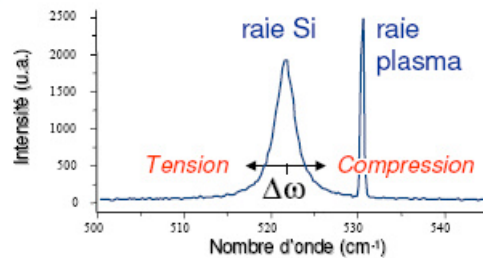


Figure II- 1: Spectre Raman du silicium monocristallin.

Application à la mesure de déformations :

Les déformations des matériaux entraînent un déplacement des raies. Ce déplacement dépend de l'ensemble ou d'une partie du tenseur. Ce qui donne une information globale sur l'état de contrainte du matériau [Wol96, Wol99]. Sauf cas particuliers comme dans le cas de contraintes uni-axiales ou bi-axiales (Equation 2 et 3), les contraintes ne peuvent être directement déduites du déplacement de la raie de diffusion. L'utilisation d'une source excitatrice polarisée permet par contre d'obtenir un résultat caractéristique d'une partie du tenseur.

Par exemple, pour du Si(001) :

$$\text{Dans le cas Hydrostatique : } Tr(\bar{\sigma})(MPa) = -531.\Delta\omega(cm^{-1}) \quad (1)$$

$$\text{Dans le cas Uniaxial : } \sigma_1 = -435.\Delta\omega(cm^{-1}) \quad (2)$$

$$\text{Dans le cas Biaxial : } \sigma_1 + \sigma_2 = -435.\Delta\omega(cm^{-1}) \quad (3)$$

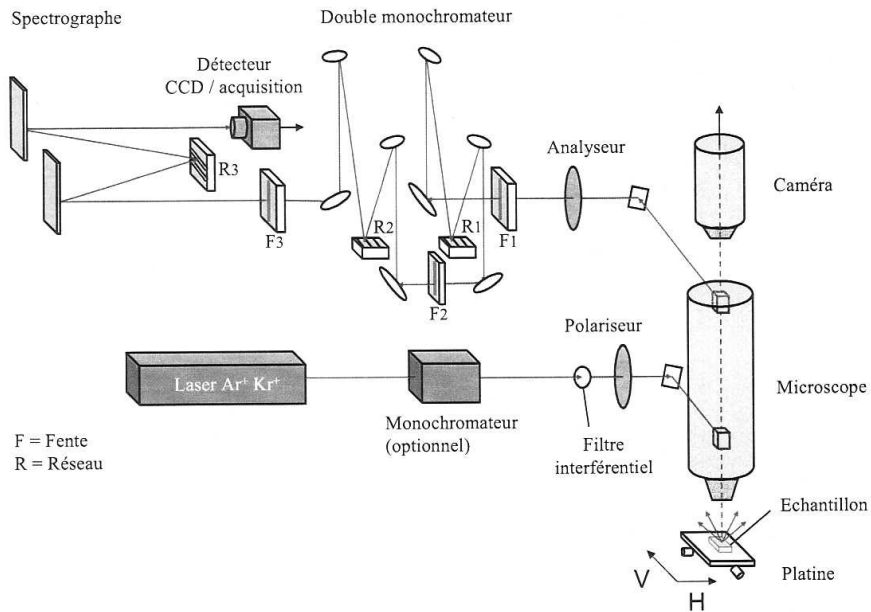


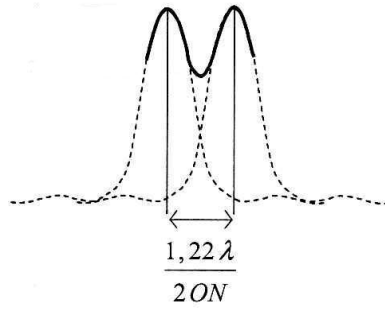
Figure II- 2: Schéma du fonctionnement d'un spectromètre Raman à 3 monochromateurs (JOBIN-YVON T64000).

En spectroscopie Raman, on distingue 2 types de résolution :

- *la résolution spectrale*, qui correspond à la précision sur la mesure de la fréquence des raies. Elle dépend principalement du nombre de monochromateurs installés sur l'instrument. Dans une moindre mesure, elle dépend aussi de la distance entre le dernier réseau (r3 sur la Figure II- 2) et le détecteur CCD et enfin de la fréquence de ce réseau. $\Delta\lambda/\lambda$ est de l'ordre de 10^{-4} mais la résolution spectrale est meilleure lorsque λ est plus grand.
- *la résolution spatiale*, très importante dans le cadre des mesures de déformations locales, est donnée par le critère de Rayleigh (Figure II- 3): $\frac{1,22\lambda}{2.ON}$

où λ est la longueur d'onde du faisceau de lumière incident à travers une optique d'ouverture numérique $ON = n \sin \theta$ (n est l'indice de réfraction du milieu et θ l'angle d'ouverture).

Le critère de Rayleigh stipule que 2 objets sont distincts sur une image si le sommet de la tâche de diffraction de l'un correspond au premier minimum de l'autre.



Critère de Rayleigh

Figure II- 3: Visualisation du critère de Rayleigh sur un spectre.

Les 2 possibilités pour améliorer la résolution spatiale sont de diminuer la valeur de λ en utilisant des lumières de type U.V. (jusqu'à $\lambda = 363$ nm) ou d'augmenter l'ouverture numérique avec des objectifs à immersion, ce qui modifie l'indice de réfraction n du milieu. Cette dernière méthode ne semble apporter qu'un gain minime alors qu'elle rend la mesure beaucoup plus difficile. Au mieux, la résolution minimum atteinte est de $0,3 \mu\text{m}$, ce qui devient limitant au regard des dimensions critiques des composants de la microélectronique.

A titre d'exemple, nous présentons une étude récente qui a porté sur les déformations induites dans des lignes de silicium allant de 10 à $0,3 \mu\text{m}$, produites par le procédé STI [Rom06]. Les profils expérimentaux ont montré des décalages positifs en fréquence dans les lignes d'active, ce qui correspond à un état de compression. Pour les lignes les plus larges, on observe des états non contraints au centre des lignes que l'on attribue à une diminution progressive des contraintes dans le silicium. Les décalages en fréquences deviennent légèrement négatifs lorsque l'on sonde à travers les STI, ce qui indique que le silicium sous-jacent est légèrement tendu. Ces mesures expérimentales ont été validées à l'aide de profils simulés à partir de la modélisation éléments finis des contraintes (Figure II- 4, lignes en pointillées). On observe un bon accord entre expérience et simulation pour des lignes allant de $10 \mu\text{m}$ à $0,3 \mu\text{m}$.

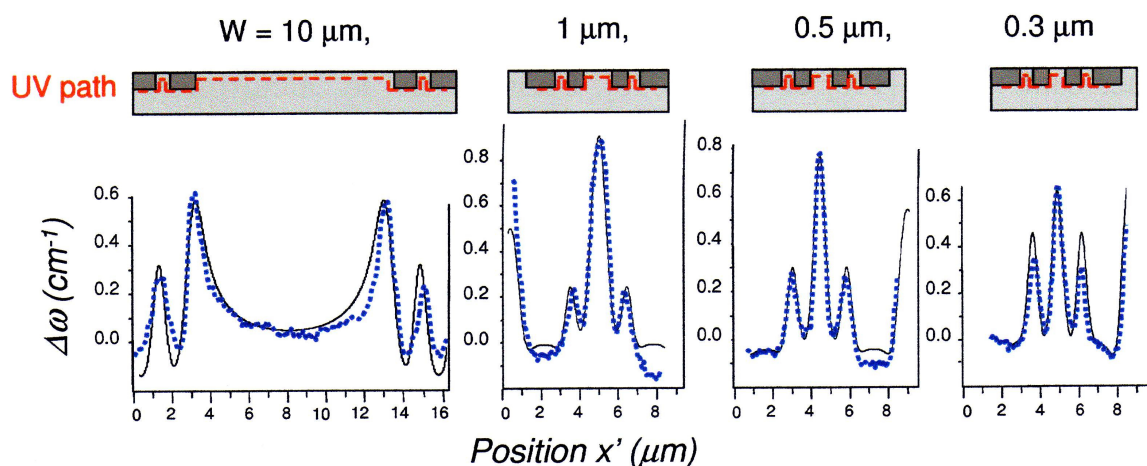


Figure II- 4: Profils simulés (traits pleins) et expérimentaux (traits pointillés) $\Delta\omega$ en fonction de la position sur les structures pour 4 tailles de lignes allant de $10\mu\text{m}$ à $0,3\mu\text{m}$ [Rom06].

1.2 Vers le 'Nano-Raman'

Le point faible de la technique de spectroscopie Micro-Raman est sa résolution spatiale limitée à $0,3\mu\text{m}$, même avec une lumière excitatrice de type UV. Des recherches ont été réalisées sur les optiques de mesures en champ proche pour la spectroscopie Raman [Aya01, Web98]. Le couplage AFM-Raman semble actuellement la meilleure méthode pour améliorer la résolution [Har03, Nov06].

Le principe de cette technique consiste à faire 2 mesures: une en champ proche + champ lointain (pointe AFM avancée) et une seconde en champ lointain (mesure Raman classique, pointe rétractée) pour soustraire cette contribution au signal de la première mesure.

L'utilisation de la pointe AFM permet une excitation Raman concentrée spatialement et amplifiée jusqu'à un facteur 10^6 . Cette technique est appelée TERS (Tip Enhanced Raman Spectroscopy), elle est nécessaire à la mesure car à ces échelles, le signal Raman devient très faible. Ces améliorations sont cependant difficiles à mettre en œuvre, notamment pour extraire la 'partie' champ proche du signal qui est minoritaire devant le champ lointain. Cette technique est encore en plein développement et reste donc prospective. Des mesures de contraintes sur du silicium ont été récemment réalisées avec une résolution de $\sim 200\text{ nm}$ [Zhu07].

2. Méthodes 'électroniques'

2.1 La microscopie électronique à transmission

La microscopie électronique permet d'atteindre des informations locales avec une résolution spatiale de l'ordre de l'Angström. Le point fort est la localisation de l'information, mais le point faible est la nécessité de préparer les échantillons sous forme de lame mince. En ce qui concerne la mesure des champs de déformation, deux techniques de microscopie peuvent être utilisées: la microscopie à haute résolution et la diffraction électronique en faisceau convergent.

2.1.1 CBED

La technique CBED (Convergent Beam Electron Diffraction) utilise la microscopie électronique à transmission (MET) avec un faisceau d'électrons convergents. Son demi-angle de convergence α est en général d'environ 10 mrad pour la mesure des déformations.

Les premiers travaux sur cette technique ont été effectués par Kossel et Möllenstedt en 1938 et 1939 [Kos39]. Le cliché de diffraction, formé dans le plan focal de la lentille objectif (Figure II- 5), est constitué d'un ensemble de disques: le disque transmis au centre et les disques diffractés correspondant aux plans réticulaires (hkl), chaque disque représentant une famille de plans cristallins. La taille des disques est proportionnelle à l'angle de convergence et vaut $2.\alpha.f$ avec f la distance focale de la lentille objectif. La distance des disques diffractés par rapport au disque transmis vaut $2.f.\theta$ avec θ l'angle de Bragg de la famille de plan (hkl) du disque diffracté.

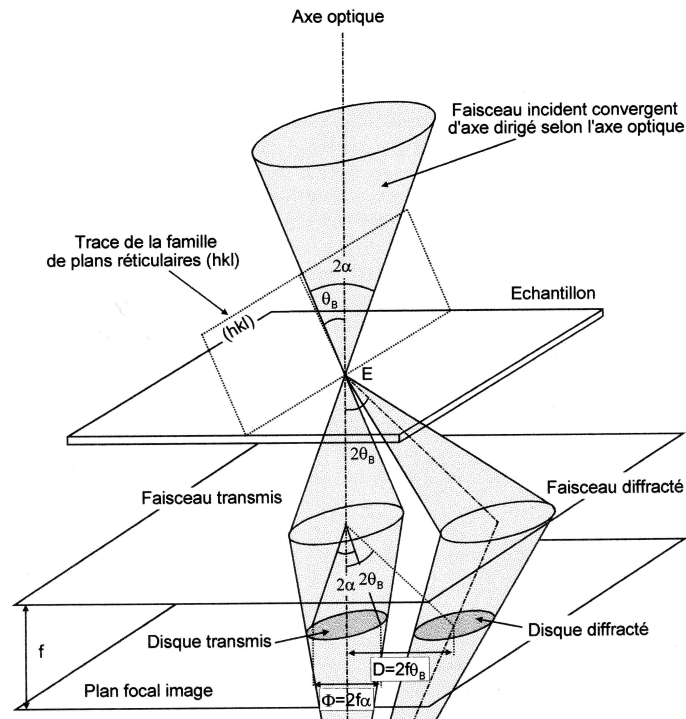


Figure II- 5: Schéma montrant le chemin du faisceau électronique incident dans le microscope électronique en transmission [Mor98].

Principe de la mesure de déformations :

Le disque transmis contient des lignes sombres appelées lignes de HOLZ (High Order Laue Zone) visibles sur la Figure II- 6c. Ces lignes proviennent d'un défaut d'électrons dû à la diffraction de plans (hkl) d'indices élevés. Ces lignes se déplacent en fonction de la valeur du paramètre de maille avec une bonne sensibilité ($\Delta a/a \sim 10^{-4}$) pour les plans d'indices élevés. L'ensemble du tenseur des déformations est obtenu par simulation du cliché CBED, à savoir en simulant la position de l'ensemble des lignes du disque transmis. Dans le cas d'une déformation homogène, les lignes vont se déplacer par rapport à leurs positions dans le substrat. La simulation est dans ce cas plutôt rapide. Pour des déformations inhomogènes (proche des interfaces), la courbure des plans atomiques entraîne un élargissement des lignes de HOLZ. La simulation devient alors beaucoup plus complexe et fait appel à la théorie dynamique.

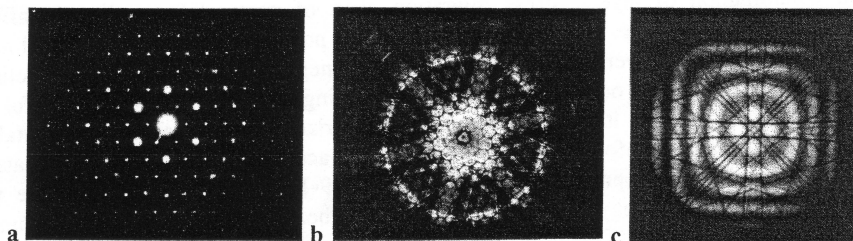


Figure II- 6 a) Cliché de diffraction avec un faisceau parallèle
 [Wol03] b) Cliché de diffraction avec un faisceau convergent
 c) Agrandissement de b) sur le disque transmis avec lignes de HOLZ

Un des premiers essais de caractérisation CBED dans des structures STI [Arm01] consista à mesurer les déformations dans des lignes de silicium de $0,22 \mu\text{m}$, jusqu'à moins de 30nm des interfaces. La relaxation associée à l'amincissement de l'échantillon était alors considérée comme du même ordre de grandeur que l'erreur sur la mesure CBED elle-même. Mais depuis, d'autres études (en particulier [Clé04]) ont montré que la relaxation entraîne une courbure de la lamelle dont on ne peut négliger l'effet sur les mesures de déformations. Il est alors nécessaire d'utiliser la simulation par éléments finis pour calculer les contraintes avant amincissement. D'autres travaux ont utilisé le CBED pour mesurer les déformations dans les STI avec des variations de procédé [Stu01, Kim04] ou en comparant les résultats obtenus par CBED avec des mesures Raman, Micro-Diffraction ou encore des simulations numériques [Sen03, Wol03].

Les avantages de cette technique de mesure résident donc dans sa très bonne résolution spatiale de l'ordre du nanomètre, de sa précision et de l'obtention de l'ensemble du tenseur à partir d'un cliché expérimental.

L'utilisation de la microscopie électronique à transmission implique des complications pour la mesure des déformations. En effet les échantillons sont préparés sous forme de lames minces de 100 à 300 nm d'épaisseur. La préparation de ces lames peut entraîner une amorphisation de la surface et une implantation ionique dans le cas du FIB (Focused Ion Beam). Il a également été montré que la faible épaisseur de la lame implique une relaxation des déformations suivant la normale à la surface. Il faut alors simuler la relaxation par éléments finis pour pouvoir retrouver la déformation initiale du matériau avant préparation de la lame mince. A cela s'ajoute la difficulté à interpréter les clichés CBED. Les lignes de HOLZ s'élargissent et se dédoublent (Figure II- 7) lorsque le gradient de déformation est trop fort et/ou lorsqu'il y a de la relaxation. La simulation du profil d'intensité de ces lignes est possible [Hou06] mais rend la méthode très complexe à utiliser.

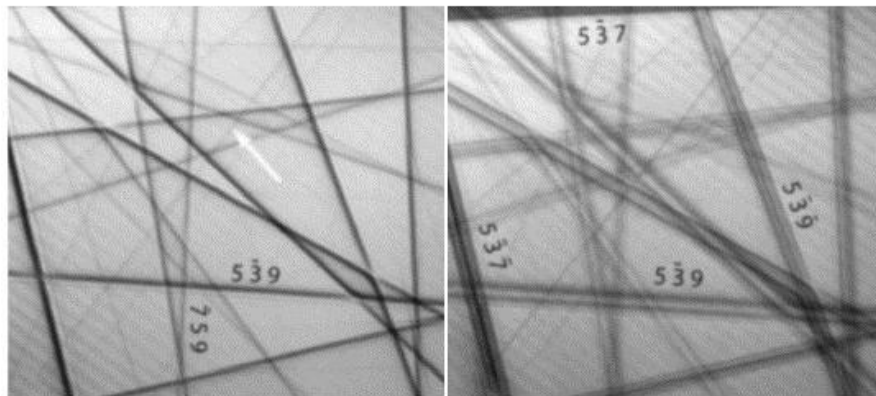


Figure II- 7: Clichés CBED dans le silicium suivant l'axe de zone [230] pris à 600nm (gauche) et 400nm (droite) d'une interface avec $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}$ [Hou06].

2.1.2 HR-TEM

La microscopie électronique à haute résolution (MEHR) permet d'imager la projection du réseau cristallin le long d'un axe de zone simple. On obtient alors des lignes de points blancs (ou noirs) représentant la projection des colonnes atomiques (Figure II- 8). Le champ de déplacement est extrait de deux façons différentes utilisant un traitement numérique soit dans

l'espace direct [Bie93] soit dans l'espace réciproque [Tak82]. Cette dernière méthode permet de traiter rapidement des champs de déformation étendus [Hyt98] car toute l'image est traitée par transformée de Fourier. Elle est aussi appelée GPA (Geometric Phase Analysis), certains aspects théoriques ont été discutés dans la publication [Rou05].

Actuellement, pour ces méthodes, la précision des mesures expérimentales est de 2/3 nm et après traitement des images on atteint une précision de 3 pm sur les déformations.

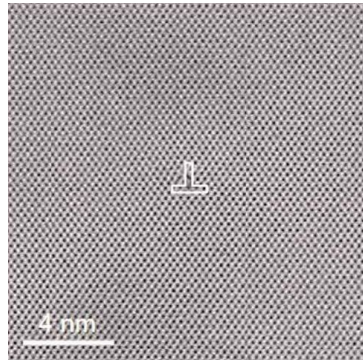


Figure II- 8: Image HRTEM autour d'une dislocation coin [Hyt06].

La méthode dans l'espace direct consiste à déterminer la position de tous les maxima d'intensité r_M dans l'image et de calculer leur déplacement $\Delta u = r_M - r_0$ par rapport au noeud voisin d'un réseau parfait extrait d'une zone de référence choisie. Ayant le champ de déplacement Δu , on peut en déduire en tout point de l'image le champ de déformation qui en est la dérivée première.

La méthode dans l'espace réciproque consiste à déterminer la transformée de Fourier (TF) numérique de l'image. La TF étant complexe on peut extraire la phase d'une composante de Fourier qui en fait est proportionnelle au déplacement Δu correspondant à cette famille de plans. Si le déplacement est une translation rigide simple du cristal, la phase présentera un saut de variation localisé à l'endroit où se produit la translation rigide (un joint de grains par exemple). La phase présentera une rampe dont la pente est proportionnelle à la différence de paramètre. La localisation de cette variation permet de donner une image de l'étendue de cette déformation. Ceci a été exploité pour déterminer le champ de déformation autour d'une dislocation coin dans Si et le comparer au champ de déformation théorique. [Hyt03, Hyt06]

De la même façon que pour la méthode CBED, la principale limitation est la relaxation de la lame à analyser après amincissement : l'état de déformation mesuré n'étant plus un état tridimensionnel [Tre85]. La relaxation, dans le cas de la microscopie haute résolution, est d'autant plus importante que la lame est amincie jusqu'à quelques dizaines de nm.

2.2 EBSD

Cette technique utilise un Microscope Electronique à Balayage (MEB) et présente donc l'avantage d'avoir une préparation d'échantillon assez aisée comparée aux méthodes de microscopie électronique à transmission. La résolution peut atteindre quelques dizaines de nanomètres selon le matériau.

Le faisceau d'électrons pénètre l'échantillon sur quelques dizaines de nm avant d'être diffusé inélastiquement sur un large domaine angulaire. Une partie des électrons ainsi diffusés va se trouver en incidence de Bragg par rapport aux différents plans cristallins entourant le point d'impact des électrons et va être diffractée donnant naissance à deux cônes de diffraction appelés cônes de Kossel. Le détecteur est le plus couramment une camera CCD haute résolution, placée à proximité de l'échantillon. L'intersection des cônes de Kossel avec le plan de la camera va produire un ensemble de paires de lignes parallèles. Les angles de diffraction étant petits pour un faisceau d'électrons très énergétiques, les deux hyperboles d'intersection sont approximées comme étant des droites, soit deux lignes parallèles appelées bandes de Kikuchi (Figure II- 9).

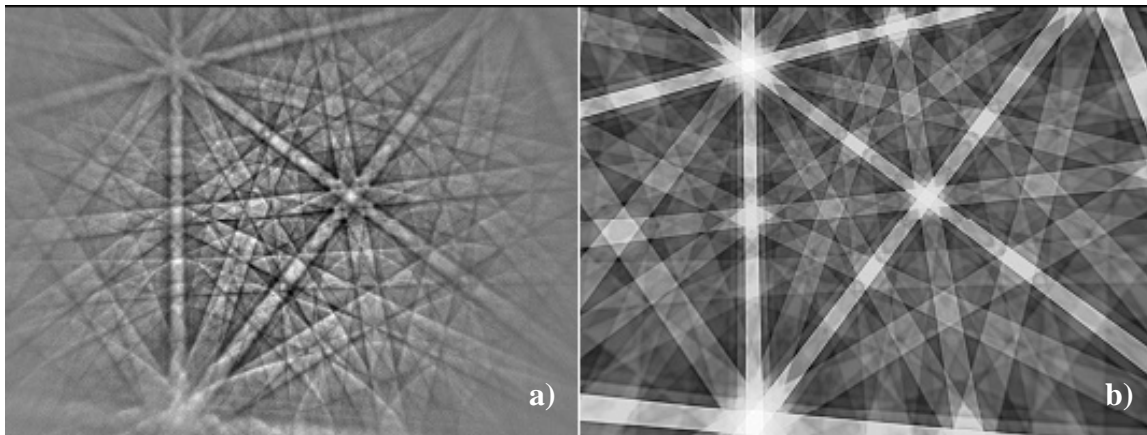


Figure II- 9: (a) Cliché EBSD expérimental (b) Simulation du diagramme EBSD (travaux de S. Villert).

Une des premières utilisations de cette technique a été la mesure d'orientation de grain [Ala54, Ven73]. L'amélioration de la sensibilité angulaire au cours des dernières années a rendu possible les mesures de déformations avec une sensibilité de 2.10^{-4} [Wil06]. Les déformations mesurées sont cependant des déformations de surface (une dizaine de nm).

La difficulté majeure de cette méthode reste l'exploitation et l'interprétation des clichés de diffraction. L'utilisation d'algorithmes d'indexation a permis de faciliter et d'accélérer les mesures. Mais pour atteindre une bonne sensibilité, de nombreuses mesures préliminaires d'étalonnage sont nécessaires. La mesure consiste à effectuer un cliché en un endroit de l'échantillon où la déformation est connue, puis d'utiliser ce cliché comme cliché de référence [Tro93]. Le cliché pris à l'endroit dont on souhaite connaître la déformation est alors comparé au cliché de référence. Par corrélations et transformées de Hough du cliché EBSD, on peut suivre les déplacements des positions et inclinaisons des bandes de Kikuchi et ainsi calculer les déformations. Le faible rapport signal sur bruit et le développement récent de la méthode pour la mesure de déformations font que cette technique est encore prospective.

3. Méthodes de diffraction des rayons X

Les techniques utilisant les rayons X pour la mesure des déformations ont l'avantage d'avoir une grande sensibilité. L'application de la loi de Bragg aux rayons X montre que leur diffraction se fait principalement aux grands angles. Ainsi, même une faible modification du paramètre de maille entraîne une variation importante de l'angle de Bragg.

3.1 Diffraction de Kossel

Le principe de mesure de la diffraction de Kossel diffère peu de l'EBSD. Un faisceau incident d'électrons ou de photons X vient exciter le matériau qui réémet des photons dans toutes les directions. Certains vont se trouver en incidence de Bragg par rapport aux familles de plans (hkl) environnants et vont donc diffracter. Comme il s'agit de diffraction de rayons X, les angles sont nettement plus grands que pour la diffraction électronique et possèdent donc une très bonne résolution en déformations (10^{-5} en théorie), chaque réflexion formant un cône de Kossel qui est l'équivalent des lignes de Kikuchi pour l'EBSD. Le détecteur CCD détecte une partie des cônes Kossel sous forme de lignes courbes (Figure II- 10). Les lignes se déplacent avec les déformations. Le traitement des résultats est donc similaire à l'EBSD. La résolution latérale et en profondeur dépend du type de faisceau (plus grande pénétration des rayons X que des électrons) et de sa taille.

Dans le cas d'un faisceau incident de rayons X, la diffraction de Kossel a été largement utilisée avec des sources synchrotron [Bre99].

Plus récemment, la méthode a été développée pour se servir d'un faisceau d'électrons comme faisceau incident. La mesure se passe dans un MEB, on gagne donc en résolution et la technique devient accessible en laboratoire. La principale difficulté reste alors le traitement du signal car le rapport signal/bruit est très faible : 1,02 (Figure II- 10). Malgré les améliorations récentes de la technique, cette utilisation de la diffraction de Kossel est toujours au stade de développement pour son application à la mesure des déformations.

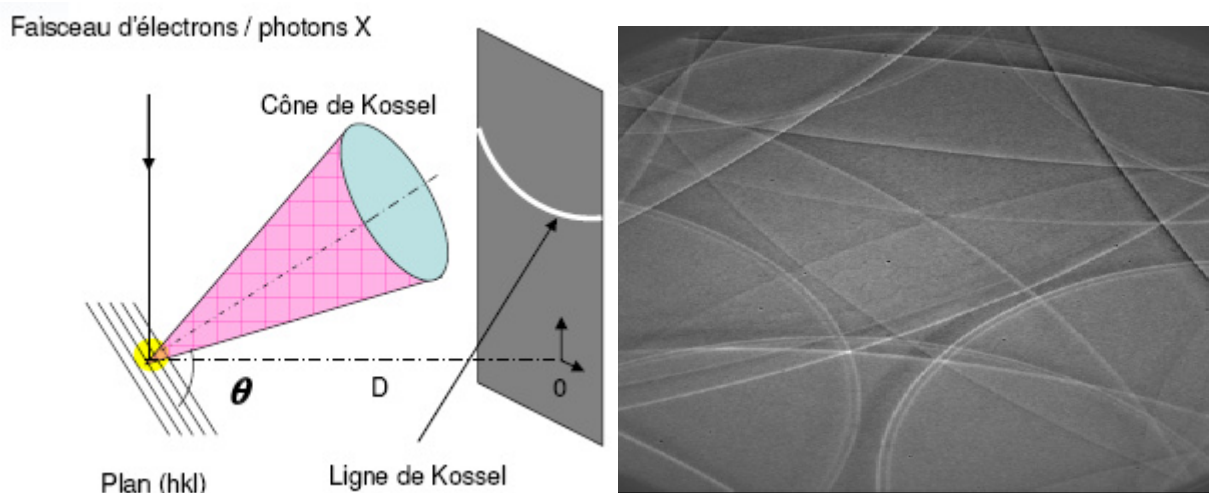


Figure II- 10: Schéma de la diffraction de Kossel (gauche) avec un cliché expérimental sur du cuivre polycristallin (droite).

3.2 Microdiffraction

La microdiffraction des rayons X est un outil très performant pour déterminer les déformations dans des matériaux aux petites dimensions. L'information locale est obtenue en diminuant au maximum la taille du faisceau. La mesure consiste en la détermination du décalage d'un ou plusieurs pics de Bragg pour obtenir directement le paramètre de maille déformé, comme pour de la diffraction classique de rayons X. Une première approche pour déterminer les déformations à l'échelle sub-micronique est d'utiliser un faisceau convergent, avec une taille de spot de l'ordre du micromètre [Yok01] ou moins [Lar02]. Il a été ainsi possible de caractériser l'état de déformation à l'échelle du micron [Mat02, Rho01] mais la petite taille du faisceau rend nécessaire l'utilisation d'un rayonnement de type synchrotron pour avoir un flux suffisant.

La microdiffraction peut se faire avec deux types de faisceaux : soit monochromatique, soit 'blanc' (polychromatique). Le choix de la configuration dépend de l'information recherchée : le faisceau 'blanc' permet d'obtenir la partie déviatorique de l'ensemble du tenseur avec un échantillon fixe, le faisceau monochromatique, quant à lui, permet d'acquérir une partie du tenseur. Pour ce dernier, les mesures nécessitent de se placer en incidence de Bragg, or à ces dimensions, on ne peut mécaniquement faire une rotation de l'échantillon sans que le faisceau ne se déplace. La partie de l'échantillon qui diffracte n'est alors plus la même d'une réflexion à l'autre...Le choix dépend aussi du type d'échantillons à analyser. Dans le cas de matériaux polycristallins (Cu, poly-silicium, etc), la taille des grains peut être également un critère de choix du faisceau. Si la taille des grains est nettement inférieure à la taille du faisceau, un faisceau monochromatique sera privilégié. Inversement, si la taille de grain est supérieure à la taille du faisceau, on travaillera en faisceau 'blanc'.

Actuellement les lignes de microdiffraction permettant des mesures à l'échelle du micron ne sont pas nombreuses. A l'ALS à Berkeley [Xra], une ligne est dédiée à cette utilisation. En Europe, depuis 2007, la ligne BM32 de l'ESRF à Grenoble consacre 10% de son temps à l'utilisation de microfaisceaux. Des discussions sont également en cours pour un projet de ligne dédiée à la microdiffraction en faisceau 'blanc' sur le synchrotron SOLEIL à St Aubin [Syn].

3.2.1 Microdiffraction monochromatique

La meilleure résolution spatiale atteinte en faisceau monochromatique est de environ 100nm à l'aide d'un guide d'onde [Fon00]. La taille du faisceau était alors de 110nm*20µm et a permis d'obtenir la déformation normale à la surface. Avec des miroirs KB, on peut actuellement atteindre des tailles de faisceaux inférieures au µm². Dans les 2 cas, la précision des mesures est inférieure à 10⁻⁴.

3.2.2 Microdiffraction en faisceau 'blanc'

Un faisceau 'blanc' est plus difficile à obtenir qu'un faisceau monochromatique car il faut conserver toutes les longueurs d'ondes. Cette méthode est également appelée micro-Laue. Elle permet d'obtenir l'orientation et les déformations dans des matériaux polycristallins et a l'avantage d'éviter la rotation de l'échantillon. Cette méthode a permis d'étudier des structures tests d'interconnexions en aluminium, avec une précision de 2*10⁻⁴ en déformation

[Dow01]. Des inhomogénéités de déformations de grain à grain et à l'intérieur même d'un grain ont été également mises en évidence [Spo03]. Les dernières avancées dans ce domaine ont permis d'atteindre des tailles de sondes submicroniques [Mur03, Mur05] et ainsi de faire des cartographies avec une résolution de $\sim 1\mu\text{m}$ sur des lignes d'Aluminium [Tam02] (Figure II- 11) ou des lignes de Cuivre [Nal05].

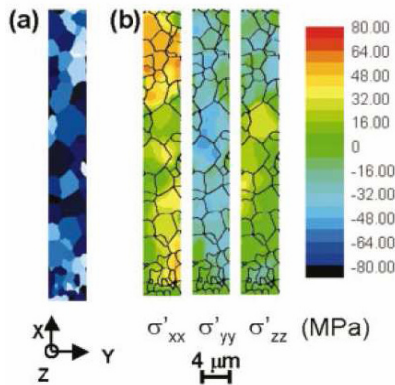


Figure II- 11: (a) Cartographie des grains dans des lignes d'interconnexion $Al(Cu)$ - (b) Distribution des composantes du tenseur des contraintes indiquant de fortes inhomogénéités [Tam02].

3.3 Diffraction haute-résolution sur un système périodique

Plutôt que de travailler avec un faisceau convergent, il est possible de travailler avec un faisceau large, sur un système périodique. L'avantage est de pouvoir additionner l'amplitude diffractée par chacune des périodes, ce qui permet d'observer des effets liés à des déformations locales avec une grande sensibilité ($<10^{-4}$) tout en utilisant un instrument de mesure de laboratoire. Cette technique nécessite un échantillon périodique et une cohérence de faisceau supérieure à la taille du motif étudié, les échantillons sont donc spécifiques à ce type d'analyse. D'ailleurs, les dispositifs de la microélectronique et notamment les mémoires, sont en très grande partie périodiques dans leur conception.

Pour cette technique, il ne s'agit plus de mesurer un décalage du pic de Bragg, mais de caractériser la distribution d'intensité. Plusieurs équipes ont utilisé cette approche pour caractériser le champ de déformation à l'échelle nanométrique [Car94, Mac90, She96, Tol94, Dar98]. Des études ont été menées sur différents systèmes, que ce soit des réseaux de lignes, des îlots, ou encore des multicouches. Cette méthode permet, avec un couplage à une simulation analytique [Kag02, She97] ou numérique (modélisation par éléments finis) [Hes03, Bau00, Lub99, Wie00, Bau00b], de caractériser localement le champ de déformation présent dans ces systèmes. En effet, le champ de déplacement, une fois simulé, est injecté dans le calcul de l'intensité diffractée, ce qui permet de comparer directement les spectres expérimentaux à ceux simulés [Lou06, Ebe06, Ebe07, Gai07].

Dans le cas de cette dernière référence, les travaux de M. Gailhanou et al. ont porté sur des lignes de silicium gravées sur un substrat SOI (Substrate On Insulator) et contraintes par un chapeau de nitrure. La périodicité était de $2\mu\text{m}$ avec des lignes de $1\mu\text{m}$ pour 100nm d'épaisseur. Les déformations les plus élevées ont été localisées sur les bords des lignes et sont à l'origine des 'moustaches' visibles pour les valeurs les plus grandes de q_x . Le bon accord entre les mesures expérimentales et simulées (Figure II- 12b) valide le champ de déplacement calculé par éléments finis.

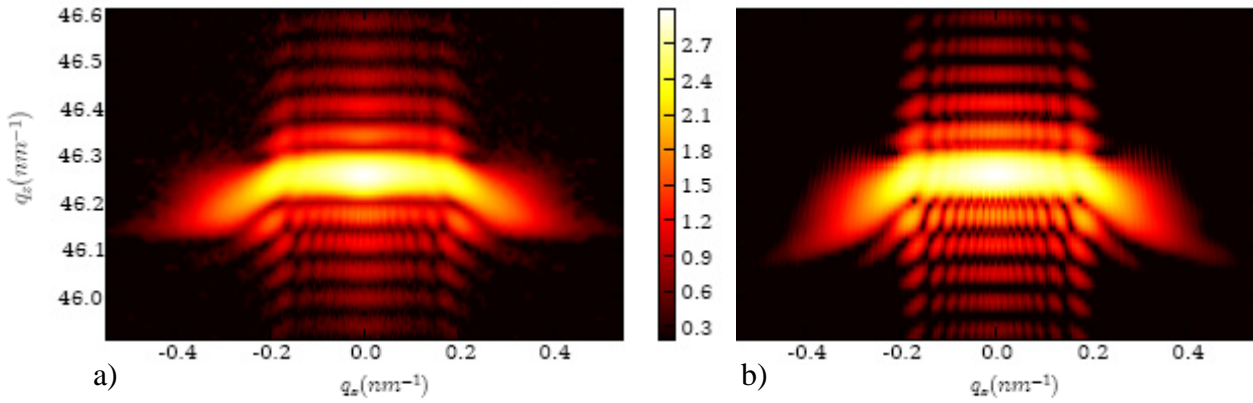


Figure II- 12: Comparaison entre les cartographies 004 expérimentales (a) et calculées (b) sur des lignes de silicium contraintes de 1 μm de large et de 100nm d'épaisseur (périodicité 2 μm) [Gai07].

3.4 Inversion directe

Les méthodes précédentes reposent sur l'utilisation d'un modèle structural à partir duquel on calcule l'intensité diffractée. Sous certaines conditions, il est cependant possible de déterminer la structure 'directement' à partir du diffractogramme, c'est-à-dire sans passer par un modèle. La difficulté de ce genre d'approche réside dans le problème de la phase. L'intensité diffractée par un cristal correspond au carré de l'amplitude. La phase, qui contient l'information sur le champ de déplacement, est donc 'perdue' lors de la mesure. La méthode d'inversion consiste donc à rechercher la phase à partir d'un algorithme basé sur une succession de transformées de Fourier (TF) et de transformées de Fourier inverses (TF⁻¹) [Ger72, Fie82] en appliquant des conditions à chaque étape (Figure II- 13). Cette technique a été appliquée à des réseaux de lignes de silicium contraintes sur substrat SOI [Min07] avec une résolution de 8 nm. Cette expérience a été menée en parallèle avec des mesures HR-XRD, sur les mêmes échantillons que la publication [Gai07] (Figure II- 12).

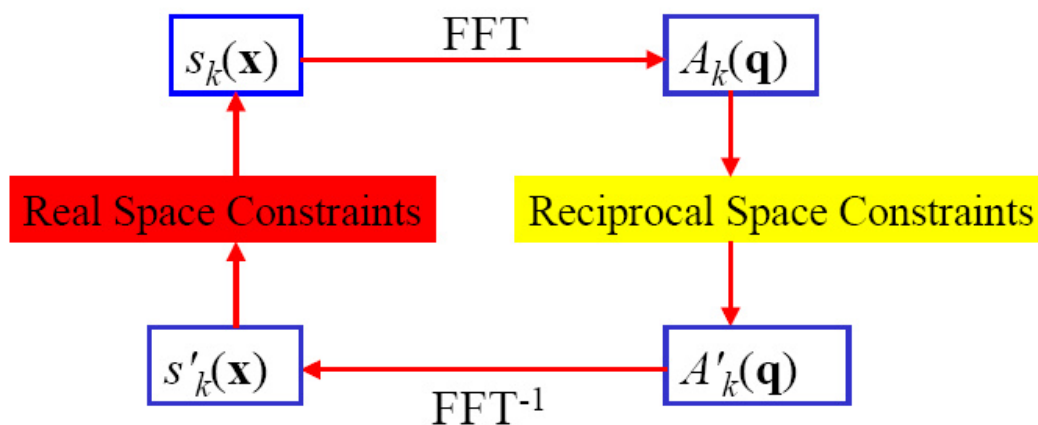


Figure II- 13: Diagramme de fonctionnement d'un algorithme d'inversion de phase.

Mais, afin d'appliquer cette technique, certains critères expérimentaux doivent être respectés :

- Volume de cohérence > taille de l'objet unique ou de la période
- Mesure en champ lointain
- Support fini (dans une direction au moins)
- Echantillonnage suffisant

La condition d'échantillonnage suffisant se traduit par l'application du Théorème de Shannon/Nyquist, qui rend nécessaire de faire des cartographies très précises de l'espace réciproque :

« La fréquence d'échantillonnage d'un signal doit être égale ou supérieure à 2 fois la fréquence maximale contenue dans ce signal, afin de convertir ce signal d'une forme analogique à une forme numérique. » D. Sayre, Acta Crystallogr. 5, 843 (1952)

3.5 Diffraction Cohérente

La diffraction cohérente fait intervenir la notion de cohérence. On distingue 2 types de cohérence : la cohérence longitudinale, liée à la monochromaticité du faisceau et la cohérence latérale, qui dépend de la divergence du faisceau (Figure II- 14).

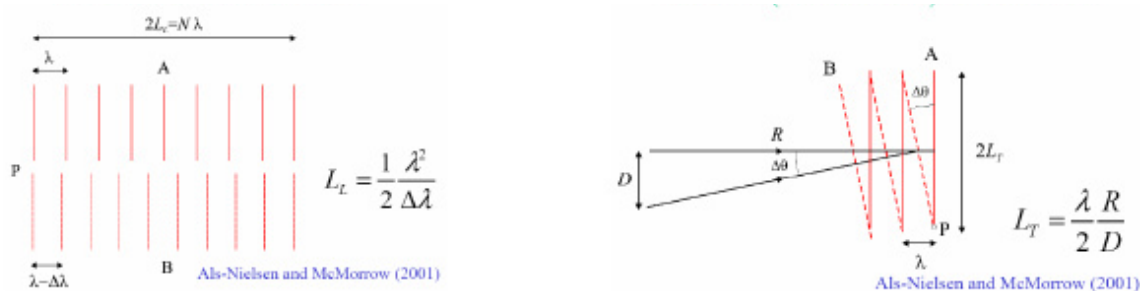


Figure II- 14: Schémas descriptifs de la cohérence longitudinale (gauche) et latérale (droite).

La diffraction cohérente a dans un premier temps été utilisée comme technique d'imagerie [Mia99, Wil03, Rob04, Sha05]. Puis avec l'amélioration des algorithmes et en modifiant les conditions limites entre chaque TF et TF⁻¹, cette technique a récemment pu être appliquée à la mesure de déformations [Pfe06] sur des objets uniques.

Conclusion

Nous avons détaillé dans ce chapitre les différentes méthodes de mesures de déformations et de contraintes locales. Bien sûr, il n'existe pas de technique universelle, chacune possède des avantages et des limitations à prendre en compte selon le type d'échantillon (polycristallin, monocristallin), la résolution spatiale nécessaire et la sensibilité voulue. Le Tableau II- 1 rassemble les caractéristiques des différentes méthodes de mesure des déformations locales décrites dans ce chapitre. Il est à noter que toutes ces techniques ne marchent que sur des échantillons cristallins.

Technique	Sensibilité ($\Delta a/a$)	Résolution Spatiale	Destructif
Spectroscopie Raman	10^{-4}	0,5 μm (latérale) 10 nm (profondeur)	non
Nano-Raman(*)	$<10^{-4}$	~ 200 nm	non
CBED	10^{-4}	nm	oui
HR-TEM	10^{-4}	$< \text{nm}$	oui
EBSD	$2 \cdot 10^{-4}$	10 nm	non
Kossel(*)	$< 10^{-4}$ (Théorique)	$< \text{mm}$ (latérale avec photons) 10 nm (latérale avec e-) qq μm (profondeur sauf films minces)	non
Micro-Diffraction	$< 10^{-4}$	100 nm * 20 μm (monochromatique) 0,5 * 0,5 μm (faisceau blanc)	non
HR-XRD	$< 10^{-4}$	qq nms	non
Diffraction Cohérente	qq 10^{-4}	~ 10 nm	non

Tableau II- 1 : Récapitulatif des caractéristiques des différentes méthodes de mesures de déformations locales. (*) Technique en développement.

Dans le cadre de mon travail de thèse, nous avons choisi de développer la technique HR-XRD. Les échantillons sur lesquels nous avons travaillé consistent en un réseau de lignes de Si(001) séparées par des tranchées STI remplies d'oxyde de silicium dont la fabrication a été détaillée dans le chapitre I. Ces structures sont donc périodiques et représentatives des mémoires de type EEPROM ou flash produites par ATMEL. Pour ce type d'analyse la diffraction X haute-résolution est particulièrement bien adaptée car la taille de l'échantillon (2*2 mm) est suffisamment grande pour obtenir assez d'intensité et permettre des analyses en laboratoire. Cette technique possède également une très bonne sensibilité aux déformations locales ($<10^{-4}$) par l'étude de cartographie de l'espace réciproque. Les résultats que nous avons obtenus avec cette technique seront décrits dans les chapitres III et IV et confrontés aux simulations par éléments finis.

Références :

- [Ala54] M.N. Alam, M. Blackman, D.W. Pashley, Proc. Roy. Soc. 221, 221 (1954).
- [Arm01] A. Armigliato, R. Balboni, S. Frabboni, A. Benedetti, A.G. Cullis, G.P. Carnevale, P. Colpani, G. Pavia, Mat. Sc. in Semic. Proc. 4, 97-99 (2001).
- [Aya01] E.J. Ayars, C.L. Jahncke, M.A. Paesler, H.D. Hallen, Journal of Microscopy 202, 142 (2001).
- [Bau00] T. Baumbach, D. Lübbert and M. Gailhanou, J. Apply. Phys **87**, 3744 (2000).
- [Bau00b] T. Baumbach, D. Lübbert and M. Gailhanou, Materials Science and Engineering **B69-70**, 392-396 (2000).
- [Bie93] R. Bierwolf, M. Hohenstein, F. Philipp, O. Brandt, G. E. Crook, K. Ploog, Ultramicroscopy 49, 273 (1993).
- [Bre99] J. Brechbühl, J. Bauch, H. -J. Ullrich, Cryst. Res. Technol. 34, 59 (1999)
- [Car94] L. D. Caro and L. Tapfer, Phys. Rev. B **B49**, 11127 (1994).
- [Clé04] L. Clément, R. Pantel, L. F. T. Kwakman and J. L. Rouvière, Apply. Phys. Lett 85(3), 1 (2004).
- [Dar98] N. Darowski, U. Pietsch, K. H. Wang, A. Forchel, Q. Shen and S. Kycia, Thin Solid Films **236**, 271-276 (1998).
- [Dow01] A. A. MacDowell, R. S. Celestre, N. Tamura, R. Spolenak, B. Valek, W. L. Brown, J. C. Bravman, H. A. Padmore, B. W. Batterman and J. R. Patel, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A **467-468**, 936-943 (2001).
- [Ebe06] M. Eberlein, S. Escoubas, M. Gailhanou, O. Thomas, P. Rohr and R. Coppard, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 913, D05-02 (2006).
- [Ebe07] M. Eberlein, S. Escoubas, M. Gailhanou, O. Thomas, J.-S. Micha, P. Rohr, R. Coppard, Phys. Stat. Sol. (a) 204(8), 2542 (2007)
- [Fie82] J.R. Fienup, Appl. Opt. 21, 2758 (1982).
- [Fon00] S. Di Fonzo, W. Jark, S. Lagomarsino, C. Giannini, L. De Caro, A. Cedola and M. Müller, Nature 403, 638 (2000).
- [Gai07] M. Gailhanou, A. Loubens, J.-S. Micha, B. Charlet, A.A. Minkevich, R. Fortunier, and O. Thomas, Appl. Phys. Lett. 90, 111914 (2007).
- [Ger72] R.W. Gerchberg and W.O. Saxton, Optik 35(2), 237 (1972).
- [Har03] A. Hartschuh, N. Anderson, L. Novotny, Journal of Microscopy 210, 234 (2003).
- [Hes03] A. Hesse, Y. Zhuang, V. Holy, J. Stangl, S. Zerlauth, F. Schäffer, G. Bauer, N. Darowski and U. Pietsch, nuclear Instruments and Methods in Physics Research B **200**, 267-272 (2003).
- [Hou06] F. Houdellier, C. Roucau, L. Clément, J.L. Rouvière, M.J. Casanove, Ultramicroscopy 106(10), 951 (2006).
- [Hyt03] M. J. Hÿtch, J. L. Putaux and J. M. Pénisson, Nature **423**, 270 (2003).
- [Hyt06] M. J. Hÿtch, J.-L. PUTAUX and J. THIBAUT, Phil. Mag. 86, 4641 (2006).
- [Hyt98] M. J. Hÿtch, E. Snoeck and R. Kilaas, Ultramicroscopy **74**, 131-146 (1998).

- [Kag02] V. M. Kaganer, B. Jenichen, G. Paris, K. H. Ploog, O. Konovalov, P. Mikulik and S. Arai, *Phys. Rev. B* **66** (035310) (2002).
- [Kim04] M. Kim, J. M. Zuo, G.-S. Park, *Appl. Phys. Lett.* **84**(12), 2181 (2004).
- [Kos39] W. Kossel, G. Möllenstedt, *Elektroneninterferenzen im konvergenten bundel. Ann. der Physik*, **36**, 113 (1939).
- [Lar02] B. C. Larson, W. Yang, G. E. Ice, J. D. Budal and J. Z. Tischler, *Nature* **415**, 887 (2002).
- [Lou06] A. Loubens, 'Champ de déformation induit dans un monocristal par un réseau de dimensions submicroniques : diffraction des rayons X en mode haute résolution et simulation par éléments finis', Thèse de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne et de l'Université Jean Monnet de Saint-Etienne (2006).
- [Lub99] D. Lübbert, G. T. Baumbach, S. Ponti, L. Leprince, J. Schneck, U. Pietsch and A. Talneau, *Europhys. Lett.* **46**, 479 (1999).
- [Mac90] A. T. Macrander and S. E. G. Slusky, *Appl. Phys. Lett* **56**, 443 (1990).
- [Mat02] J. Matsui, Y. Tsusaka, S. Takeda, M. Urakawa, Y. Kagoshima and S. Kimura, *Journal of Crystal Growth* **237-239**, 317-323 (2002).
- [Mia99] J. Miao, P. Charalambous, J. Kirz, D. Sayre, *Nature* **400**, 342 (1999)
- [Min07] A.A Minkevich, M. Gailhanou, J.-S. Micha, B. Charlet, V. Chamard, O. Thomas, *Phys. Rev. B* **76** (10), 104106 (2007)
- [Mor98] J.P. Morniroli, Sfu, Paris, 1998.
- [Mur03] C.E. Murray, I.C. Noyan, P.M. Mooney, B. Lai, and Z. Cai, *Applied Physics Letters* **83**(20), 4163 (2003).
- [Mur05] C.E. Murray, H.-F. Yan, C. Noyan, Z. Cai, and B. Lai, *Journal of Applied Physics* **98**, 1 (2005).
- [Nal05] P.J. McNally, J. Kanatharana, B.H.W. Toh, D.W. McNeill, A.N. Danilewsky, T. Tuomi, L. Knuuttila, J. Riikonen, J. Toivonen, and R. Simon, *Journal of Applied Physics* **96**, 7596 (2005).
- [Nov06] L. Novotny, S.J. Stranick, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **57**, 303 (2006).
- [Pfe06] M.A. Pfeifer, G.J. Williams, I.A. Vartanyants, R. Harder, I.K. Robinson, *Nature* **442**, 63 (2006).
- [Ram28] Raman, *Nature* **121**, 619 (1928).
- [Rho01] H. Rho, H. E. Jackson and B. L. Weiss, *J. Appl. Phys* **90** (1), 276 (2001).
- [Rob04] I.K. Robinson and J. Miao, *MRS Bulletin*, 177 (2004)
- [Rom06] E. Romain-Latu, 'Mesures de contraintes par spectroscopie et imagerie Raman dans des dispositifs micro-électroniques', thèse de l'INP Grenoble (2007).
- [Rou05] J. L. Rouviere, E. Sarigian, *Ultramicroscopy* **106**, 1 (2005).
- [Sen03] V. Senez, A. Armigliato, I. De Wolf, G. Carnevale, R. Balboni, S. Frabboni, A. Benedetti, *Journal of Appl. Phys.* **94**(9), 5574 (2003).
- [Sha05] D. Shapiro, P. Thibault, T. Beetz, V. Elser, M. Howells, C. Jacobsen, J. Kirz, E. Lima, H. Miao, A.M. Neiman, D. Sayre, *Appl. Phys. Sc.* **102**(43), 15343 (2005)

- [She96] Q. Shen, S. W. Kycia, E. S. Tentarelli, W. J. Schaff and L. F. E. Astman, Phys. Rev. B **B54**, 16381 (1996).
- [She97] Q. Shen and S. Kycia, Phys. Rev. B **55** (23), 15791 (1997).
- [Sme23] A. Smekal, Naturwiss 11, 873 (1923).
- [Spo03] R. Spolenak, W. Brown, N. Tamura, A. MacDowell, R. Celestre, H. Padmore, B. Valek, J. C. Bravman, T. Marieb, H. Fujimoto, B. Batterman and J.R. Patel, Phys. Rev. Letter **90** (096102) (2003).
- [Stu01] C. Stuer, J. Van Landuyt, H. Bender, I. De Wolf, R. Rooyackers, G. Badenes, Journal of Electrochem. Soc. 148(11), G597 (2001).
- [Syn] <http://www.synchrotron-soleil.fr/portal/page/portal/Soleil/PlanSite>
- [Tak82] M. Takeda, H. Ina, S. Kobayashi, J. Opt. Soc. Am. 72, 156 (1982).
- [Tam02] N. Tamura, A.A. MacDowell, R.S. Celestre, H.A. Padmore, B. Valek, J.C. Bravman, R. Spolenak, W.L. Brown, T. Marieb, H. Fujimoto, B.W. Batterman, and J.R. Patel, Applied Physics Letters 80, 3724 (2002).
- [Tol94] M. Tolan, W. Press, F. Brinkop and J. P. Kotthaus, J. Appl. Phys **75**, 7761 (1994).
- [Tre85] J. M. M. Treacy, J. M. Gibson and A. Howie, Phil. Mag. **A51**, 389-417 (1985).
- [Tro93] K.Z. Troost, P. Sluis, D.J. Gravesteijn, Appl. Phys. Lett. 62(10), 1110 (1993).
- [Ven73] J.A. Venables, C.J. Harland, Philos. Mag. 27, 1193 (1973).
- [Web98] S. Webster, D.N. Batchelder, D.A. Smith, Appl. Phys. Lett. 72(12), 1478 (1998).
- [Wie00] T. Wiebach, M. Schmidbauer, M. Hanke, H. Raidt, R. Köhler and H. Wawra, Phys. Rev. B **B 61**, 5571 (2000).
- [Wil03] G.J. Williams, M.A. Pfeifer, I.A. Vartanyants, I.K. Robinson, Phys. Rev. Lett. 90, 175501 (2003)
- [Wil06] A.J. Wilkinson, G. Meaden, D.J. Dingley, Ultramicroscopy 106, 307 (2006).
- [Wol03] I. De Wolf, V. Senez, R. Balboni, A. Armigliato, S. Frabboni, A. Cedola, S. Lagomarsino, Invited Paper MAM 2003.
- [Wol96] I. De Wolf, H. E. Maes, S. K. Jones, J. Appl. Phys. 79(6), 7146 (1996).
- [Wol99] I. De Wolf, E. Anastassakis, J. Appl. Phys. 85(10), 7484 (1999).
- [Xra] <http://xraysweb.lbl.gov/microdif/>
- [Yok01] K. Yokoyama, S. Takeda, M. Urakawa, Y. Tsusaka, Y. Kagoshima, J. Matsui, S. Kimura, H. Kimura, K. Kobayashi, T. Ohhira, K. Izumi and N. Miyamoto, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A **467-468**, 1205-1208 (2001).

CHAPITRE III

**La diffraction des rayons X
en haute-résolution :**

**Application à l'étude des déformations
locales dans des réseaux STI**

Nous avons choisi la technique de diffraction de rayons X haute-résolution pour mesurer les déformations locales dans les structures STI. Cette méthode est bien adaptée pour des mesures sur des réseaux périodiques de lignes de silicium monocristallin. La première partie de ce chapitre porte sur les principes de base de la diffraction de rayons X et plus particulièrement dans le cas d'échantillons périodiques. Les protocoles expérimentaux et les simulations sont ensuite décrits puis l'influence de la période des échantillons (de 2 μm à 200 nm) sur les spectres est présentée. Enfin un programme d'ajustement des cartographies expérimentales à partir d'un modèle mécanique est exposé. Il est à noter que toutes les cartographies représentées dans ce chapitre sont en échelle logarithmique.

1. La diffraction de rayons X

Le but de ce paragraphe n'est pas de donner un exposé exhaustif sur la théorie de la diffraction de rayons X, que l'on pourra trouver dans les livres suivants [War90, Hol99, Sch87, Dai99, Gui94, Few03]. Il s'agit plutôt d'en donner quelques aperçus en se restreignant aux aspects en relation avec le travail présenté ici.

1.1 Amplitude diffusée dans l'approximation cinématique:

L'interaction rayons X – matière est suffisamment faible pour qu'il soit bien souvent possible de négliger la diffusion multiple. C'est ce que l'on appelle l'approximation cinématique. Dans le cadre de cette approximation, l'amplitude diffusée est une simple transformée de Fourier de la densité électronique [Gui56, Aza74, Cow75]. Cette approximation est plus encline à se vérifier pour des couches minces. Par contre, dans les cristaux parfaits en condition de Bragg, la diffusion multiple n'est plus négligeable et il faut alors utiliser la théorie dynamique [Aza74, Uly95, Ste94, Ste98]. En considérant la théorie cinématique, nous avons décrit l'amplitude diffusée dans le cas général puis dans le cas d'un système périodique et enfin pour un cristal parfait et un cristal déformé.

On définit respectivement \vec{k} et \vec{k}' comme les vecteurs d'onde des ondes incidentes et diffusées. La diffusion étant élastique, $k=k'=2\pi/\lambda$ avec λ la longueur d'onde du rayonnement utilisé. On définit également le vecteur de diffusion $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$ et on note 2θ l'angle entre \vec{k} et \vec{k}' . On en déduit $q = \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta)$ [War90].

L'amplitude totale diffusée par un solide quelconque dans la direction \vec{k}' apparaît comme la transformée de Fourier de la densité électronique $\rho(\vec{r})$:

$$A(\vec{q}) = \int \rho(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} d^3 r = TF[\rho(\vec{r})] \quad (1)$$

Dans le cas d'un solide constitué d'atomes j et en discrétisant les positions atomiques dans ce solide, la densité électronique peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\rho(\vec{r}) = \rho_j(\vec{r}) * \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \quad (2)$$

Avec \vec{r}_j les positions des atomes j. En effectuant la transformée de Fourier de l'équation 2 on obtient l'expression suivante :

$$TF[\rho(\vec{r})] = TF[\rho_j(\vec{r})] \sum_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j} = \sum_j f_j(\vec{q}) \cdot e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}_j} \quad (3)$$

L'amplitude diffusée par les atomes j est notée $f_j(\vec{q})$, c'est le facteur de diffusion atomique.

Le caractère cristallin d'un matériau est défini par l'existence ou non dans ce matériau d'une distribution périodique des atomes sur une distance plus ou moins grande. Dans un cristal parfait, nous pouvons écrire l'amplitude diffusée comme étant le produit de la contribution de la maille et du motif. Soit \vec{R}_j un vecteur du réseau de Bravais, la densité électronique d'un cristal infini peut s'écrire :

$$\rho(\vec{r}) = \rho_m(\vec{r}) * \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{R}_j) \quad (4)$$

avec $\rho_m(\vec{r})$ la densité électronique dans une maille. Par conséquent, l'amplitude peut s'écrire :

$$A(\vec{q}) = TF[\rho(\vec{r})] = TF[\rho_m(\vec{r})] \sum_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} = F(\vec{q}) \cdot \sum_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} \quad (5)$$

avec $F(\vec{q}) = TF[\rho_m(\vec{r})]$ défini comme le facteur de structure de la maille.

Le terme $\sum_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j}$ est, quant à lui, proportionnel à $\sum_{\vec{G}} \delta(\vec{q} - \vec{G})$ avec \vec{G} le vecteur de diffusion d'une raie de Bragg. On voit que ce terme est différent de 0 uniquement lorsque :

$$\vec{q} = \vec{G} \quad (6)$$

Cette équation est appelée condition de Laue. La diffraction dans un cristal n'a lieu que lorsque cette condition est respectée.

Les expressions de la densité électronique et de l'amplitude écrites ci-dessus (équations 4 et 5) correspondent au cas d'un cristal infini. Dans le cas d'un système de taille finie, on introduit un terme qui représente la géométrie de la structure étudiée. Ce terme est appelé facteur de forme dans l'expression de l'amplitude diffusée (équation 8). On obtient alors les expressions suivantes :

$$\rho(\vec{r}) = s(\vec{r}) \cdot \rho_m(\vec{r}) * \sum_j \delta(\vec{r} - \vec{R}_j) \quad (7)$$

$$A(\vec{q}) = S(\vec{q}) * F(\vec{q}) \cdot \sum_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} \quad (8)$$

Avec $S(\vec{q})$ la transformée de Fourier de $s(\vec{r})$, la forme de l'objet.

1.2 Représentation de l'espace réciproque

La diffraction de chaque famille de plans du cristal donne lieu à l'apparition d'un pic de Bragg (représenté par un point sur la Figure III- 1) dans l'espace réciproque dont les coordonnées se notent q_x , q_y et q_z ou alors H, K, L en coordonnées réduites (Equation 9 et 10). Le long de l'axe L, la diffraction est dite symétrique car l'angle de sortie est égal à l'angle incident ($\omega=2\theta/2$) comme on le voit sur le schéma de gauche de la Figure III- 2. Dans cette géométrie, le vecteur de diffusion \vec{q} n'a pas de composante suivant x car il est normal à la surface. Les mesures de raies symétriques donnent donc des informations suivant la direction z uniquement. Dans les autres cas, la diffraction est dite asymétrique ($\omega \neq 2\theta/2$) comme sur le schéma de droite de la Figure III- 2. Dans cette géométrie, l'angle d'incidence ω n'est plus égal à θ . Le vecteur de diffusion possède alors une composante suivant chaque direction x et z.

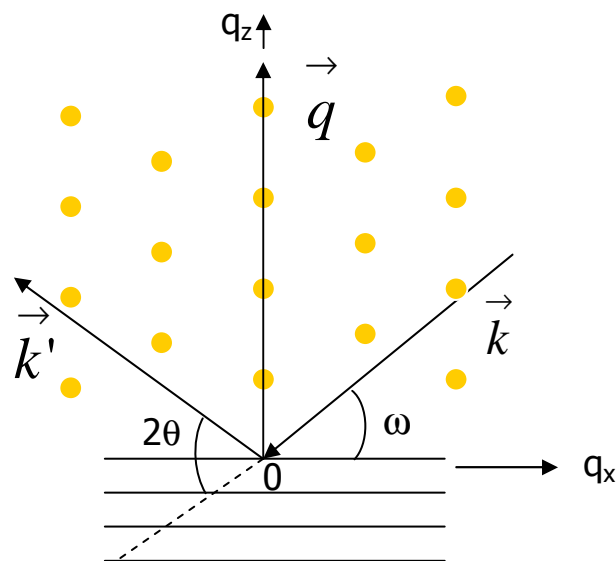


Figure III- 1: Représentation de l'espace réciproque d'un cristal cubique (001) orienté [110] avec \vec{k} vecteur d'onde incident et \vec{k}' vecteur d'onde diffusé

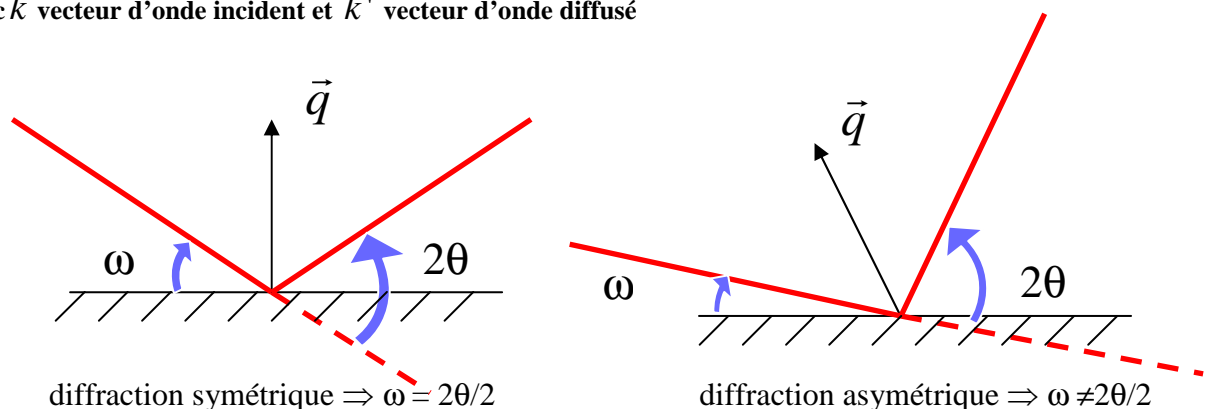


Figure III- 2: Schéma représentant les configurations de diffraction symétrique et asymétrique

On peut définir l'espace réciproque accessible en condition de réflexion à partir des vecteurs \vec{k} et \vec{k}' . Cela se décrit géométriquement par la construction d'Ewald. Les mesures de

l'espace réciproque peuvent se faire pour les réflexions situées entre la sphère de rayon $4\pi/\lambda$ et les 2 sphères limites d'Ewald correspondant à k et k' parallèles à la surface (Figure III- 3).

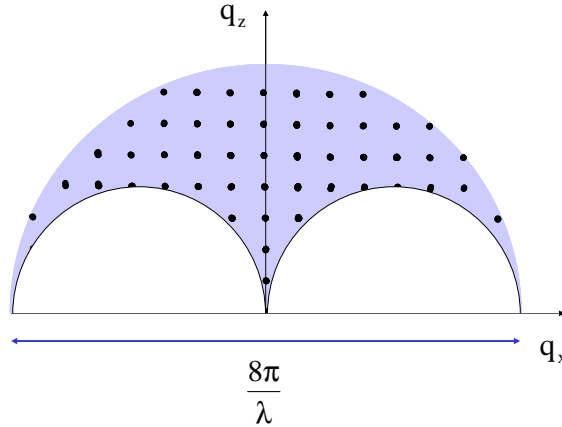


Figure III- 3: Schéma représentant l'espace réciproque accessible par réflexion

Dans l'ensemble du manuscrit, les coordonnées réduites H, K et L de l'espace réciproque ont été utilisées. Elles sont définies comme suit dans le repère cristallographique [100] [010] [001] :

$$q_x = H \cdot \frac{2\pi}{a_{Si}} \quad q_y = K \cdot \frac{2\pi}{a_{Si}} \quad q_z = L \cdot \frac{2\pi}{a_{Si}} \quad (9)$$

avec a_{Si} le paramètre de maille du silicium, valant 5,4307 Å.

Lorsque le repère cristallographique est $[110] [\bar{1}10] [001]$, H, K et L s'écrivent :

$$q_x = H \cdot \frac{2\sqrt{2}\pi}{a_{Si}} \quad q_y = K \cdot \frac{2\sqrt{2}\pi}{a_{Si}} \quad q_z = L \cdot \frac{2\pi}{a_{Si}} \quad (10)$$

1.3 Cas d'un système périodique

Dans le cas où le système étudié est périodique à l'échelle macroscopique dans la direction x, le facteur de forme prend une forme particulière :

$$s(\vec{r}) = \sum_n^{N-1} \sigma(\vec{r}) * \delta(x - n\Lambda) \quad (11)$$

$$S(\vec{q}) = \sum_n^{N-1} e^{iq_x n\Lambda} \cdot \hat{\sigma}(\vec{q}) \quad (12)$$

Avec Λ la période et $\hat{\sigma}(\vec{q})$ la transformée de Fourier de la densité électronique d'une période et N le nombre de périodes.

L'intensité s'écrit comme le carré de l'amplitude et vaut donc :

$$I(\vec{q}) = |A(\vec{q})|^2 = |F(\vec{q})|^2 \cdot |S(\vec{q})|^2 = |F(\vec{q})|^2 \cdot |\hat{\sigma}(\vec{q})|^2 \cdot \left[\frac{\sin^2\left(\frac{Nq_x\Lambda}{2}\right)}{\sin^2\left(\frac{q_x\Lambda}{2}\right)} \right] \quad (13)$$

avec $F(\vec{q})$ le facteur de structure du silicium et Λ le nombre de périodes N qui diffusent de manière cohérente et que l'on peut assimiler à la longueur de cohérence du faisceau de rayons X. L'intensité diffractée s'écrit donc comme le produit de deux termes, l'un du à une cellule unité, l'autre à la répétition de cette cellule. Les maxima espacés périodiquement tous les $q_x = p \frac{2\pi}{\Lambda}$ ont une intensité modulée par la cellule unité. Ce signal est appelé enveloppe, et cette enveloppe est échantillonnée par le terme en \sin^2 dû à la périodicité. La périodicité fait donc apparaître de part et d'autre du pic de Bragg des satellites, dans la direction de la période.

Examinons le cas concret d'un réseau de lignes de silicium, obtenu par gravure d'un substrat orienté (001) (Figure III- 4). La Figure III- 5 représente une cartographie 004 du silicium mesurée dans le plan (110) perpendiculairement aux lignes. On observe des satellites espacés périodiquement de part et d'autre du pic de Bragg du silicium. Ils sont générés par la structure périodique du silicium. Comme il n'y a pas de déformation dans la structure, l'intensité diffractée peut être considérée comme la signature de la forme de l'échantillon.

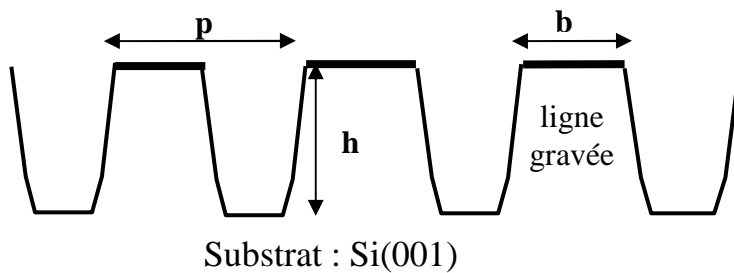


Figure III- 4: Représentation schématique d'un réseau de lignes de silicium non déformées. $p=580$ nm, $b=240$ nm, $h= 410$ nm

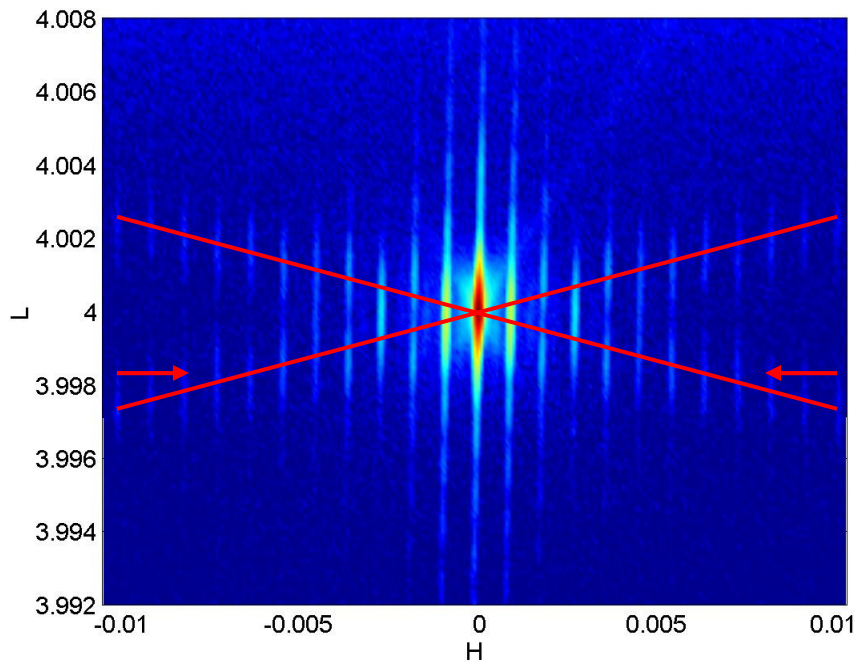
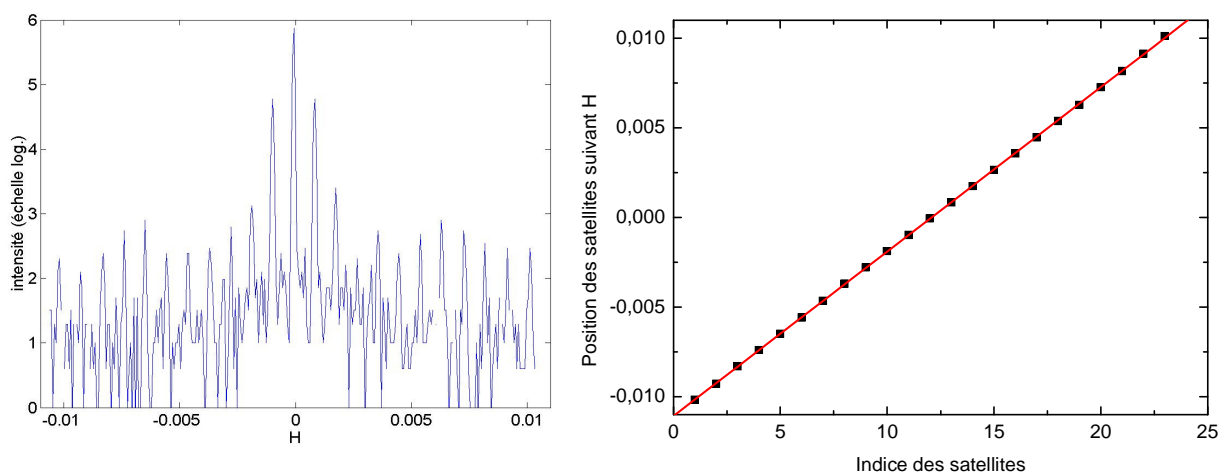


Figure III- 5: Cartographie symétrique 004 d'un réseau de lignes de silicium (représenté en Erreur ! Source du renvoi introuvable.). $p=580$ nm, $b=240$ nm, $h= 410$ nm

En relevant la position des satellites suivant la direction H nous pouvons calculer précisément la période du système. Pour une meilleure précision, on moyenne l'information sur un maximum de satellites. La Figure III- 6a montre le balayage suivant la direction H (entre les 2 flèches sur la Figure III- 5). Chaque satellite est ensuite indicé, et pour chaque indice nous reportons la position en H du satellite associé (Figure III- 6b) pour calculer la période à partir de la pente moyenne.



**Figure III- 6: a) Balayage suivant la direction H utilisé pour calculer la période.
b) Position des satellites en fonction de leur indice.**

Sur la Figure III- 6a nous pouvons mesurer la position des satellites. L'espacement entre 2 satellites consécutifs étant de $\Delta q_x = \frac{2\pi}{\Lambda}$ avec $\Delta q_x = \frac{\Delta H}{a_{Si}}$, on a donc $\Lambda = \frac{2\pi \cdot a_{Si}}{\Delta H}$. La

pende de la droite obtenue par régression linéaire (Figure III- 6b) nous permet ainsi de calculer la période du système. Ici, nous mesurons une période de 592 nm pour une période nominale de 580 nm. Ce qui correspond à un écart relatif de 2,2 %. Cet écart est surprenant car lors de la fabrication, un tel écart sur chaque période entraînerait un décalage de plusieurs microns au bord du circuit intégré, ce qui n'est pas le cas dans la pratique. Cependant la mesure de la période par diffraction s'est montrée très précise. ($R^2=0,99996$ pour la régression linéaire sur les 23 points). Aucun élément ne nous permet d'expliquer cette différence pour l'instant.

Sur la Figure III- 5, il est également visible que l'enveloppe est en forme de croix. Cette enveloppe représente le facteur de forme de l'échantillon qui a été décrit dans le paragraphe 1.1 (Equation 7 et 8). Cette forme est également visible sur les exemples de cartographies simulées dans le paragraphe 1.5 (Figure III- 8 et Figure III- 9). L'angle formé par rapport à l'axe H (lignes rouges) correspond à la direction des normales aux pentes de la ligne de silicium et vaut $\sim 14,5^\circ$, ce qui est en accord avec l'angle de 15° observé sur les clichés MEB. Pour le satellite contenant le pic substrat, on remarque aussi une modulation suivant la direction L, cette modulation provient de la hauteur des tranchées.

1.4 Cas d'un cristal déformé

1.4.1 Déformations homogènes

Considérons à présent le cas d'un cristal déformé pour lequel la maille n est déplacée de \vec{u}_n . L'amplitude diffusée s'écrit désormais sous la forme :

$$A(\vec{q}) = S(\vec{q}) * F(\vec{q}) \cdot \sum e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R} + \vec{u})} \quad (14)$$

Dans le cas d'une déformation homogène dans la direction x, le déplacement varie linéairement dans cette direction proportionnellement à la déformation. Tout se passe comme si l'on avait un nouveau cristal avec un paramètre de maille légèrement différent de celui non déformé, ce qui se traduit par un décalage du pic de Bragg. Une déformation homogène dans l'ensemble de la ligne aurait pour effet de former un second pic de diffraction sur la cartographie indépendamment du substrat. Dans le cas d'une déformation positive, le second pic doit apparaître vers les petites valeurs de H ou L. A l'opposé, une déformation négative ferait apparaître le pic de diffraction vers les grandes valeurs de H ou L. La mesure de la déformation homogène se déduit alors directement de la mesure du décalage du pic de diffraction. Cette technique permet de remonter au tenseur de déformation complet par des mesures de décalage sur différentes raies. Inversement, la seule connaissance de la valeur de déformation permet de calculer le spectre ou la cartographie de diffraction. La cartographie de l'espace réciproque calculée dans le cas d'une ligne de silicium avec une déformation homogène (Figure III- 9) montre bien ce décalage de pic dans le paragraphe 1.5.

1.4.2 Déformations inhomogènes

Si la déformation est inhomogène la connaissance du champ de déplacement \vec{u}_j est nécessaire au calcul de l'amplitude diffusée. L'intensité s'écrit :

$$I(\vec{q}) = |A(\vec{q})|^2 = |S(\vec{q})|^2 * |F(\vec{q})|^2 \left| \sum_j e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_j + \vec{u}_j)} \right|^2 \quad (15)$$

Cette expression peut être écrite différemment, moyennant une petite approximation. En effet, lorsque l'on s'écarte des conditions de Bragg, on peut décomposer le vecteur \vec{q} en $\vec{G} + \vec{s}$ avec \vec{G} le vecteur de diffusion de la raie de Bragg et $|\vec{s}| \ll |\vec{G}|$.

Dans le cas de petites déformations, le produit scalaire $(\vec{s} \cdot \vec{u}_j)$ devient négligeable et on peut écrire :

$$\left| \sum_j e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_j + \vec{u}_j)} \right|^2 \approx \left| \sum_j e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_j} e^{i\vec{G} \cdot \vec{u}_j} \right|^2 \quad (16)$$

L'amplitude s'écrit alors comme une transformée de Fourier, ce qui simplifie la simulation des cartographies du réseau réciproque (voir paragraphe 3.2 pour le calcul de cartographie par transformée de Fourier). On peut aussi définir la densité électronique de l'objet déformé $\rho_{def}(\vec{r})$ que l'on pourra écrire en fonction du terme $e^{i\vec{G} \cdot \vec{u}_j}$:

$$\rho_{def}(\vec{r}) = \rho(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{G} \cdot \vec{u}_j} \quad (17)$$

Si on se rapporte à l'équation (1), l'amplitude peut alors s'écrire :

$$A(\vec{q}) = TF[\rho_{def}(\vec{r})] \quad (18)$$

Considérons à présent un échantillon de même géométrie que la Figure III- 4 mais cette fois-ci avec des tranchées remplies d'oxyde de silicium. En considérant un refroidissement de la structure, nous ne sommes plus dans un cas de déformations homogènes. Le champ de déformation devient alors plus complexe. La Figure III- 7 représente une cartographie expérimentale d'une telle structure. On remarque tout de suite que le signal diffracté est également beaucoup plus complexe et très différent de la même cartographie sur un échantillon non déformé (Figure III- 5).

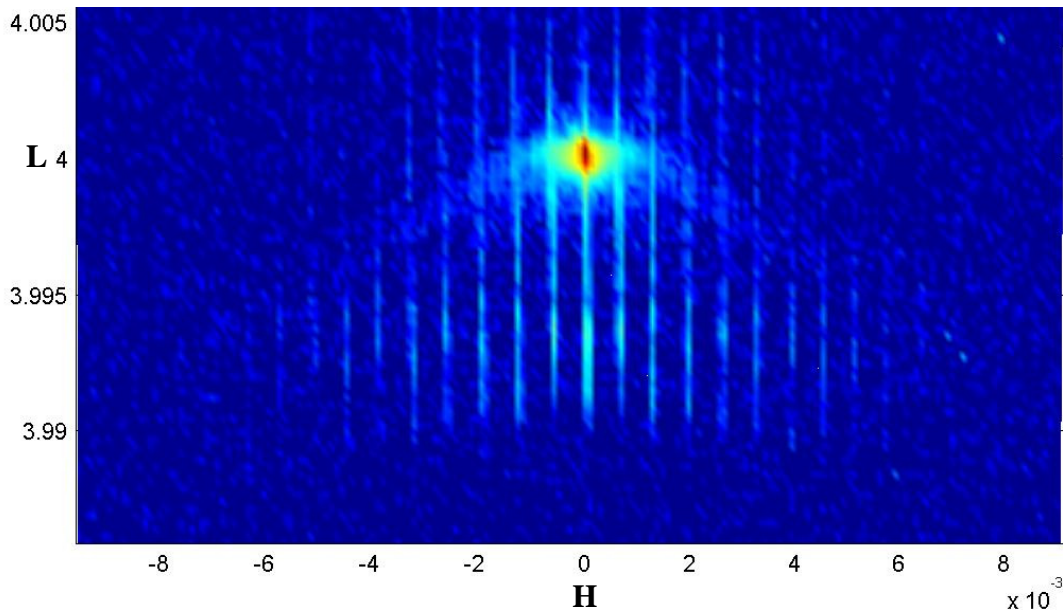


Figure III- 7: Cartographie symétrique 004 réalisée en laboratoire sur un échantillon de paramètre $p = 580$ nm.

Des déformations inhomogènes entraînent donc des modifications non intuitives de la cartographie. L'interprétation précise de ce type de cartographie est donnée dans le paragraphe 4.1 de ce chapitre mais on peut d'ores et déjà distinguer 3 points essentiels :

- 1) La diffraction du substrat non déformé donnant lieu au pic de Bragg très intense.
- 2) L'enveloppe complexe de l'ensemble du signal diffracté, liée aux parties déformées de l'échantillon. Sa position par rapport au pic du substrat nous renseigne sur le signe des déformations locales: un décalage vers des valeurs plus petites de L signifie des déformations positives et inversement, un décalage vers des valeurs plus grandes indique des déformations négatives.
- 3) L'échantillonnage de cette enveloppe par des satellites allongés suivant la direction L , lié à la périodicité dans la direction x de l'espace réel.

1.5 Exemple de calcul d'intensité par transformée de Fourier

Nous allons à présent montrer des calculs de cartographies de l'espace réciproque effectués par FFT, et ceci pour quelques cas simples. Prenons tout d'abord le cas d'une ligne trapézoïdale de silicium non déformé. La Figure III- 8 montre la géométrie de la ligne et la cartographie 004 de cette ligne obtenue par simulation. On voit clairement le pic de Bragg très intense du silicium. Le signal diffracté autour du pic prend une forme de croix dont les directions correspondent aux normales des pentes de la ligne (angle α sur la géométrie et la cartographie). On remarque également un bon accord avec la mesure représentée en Figure III- 5 (réseau de lignes non déformées) excepté que pour les cartographies simulées, le signal n'est pas échantillonné par des satellites.

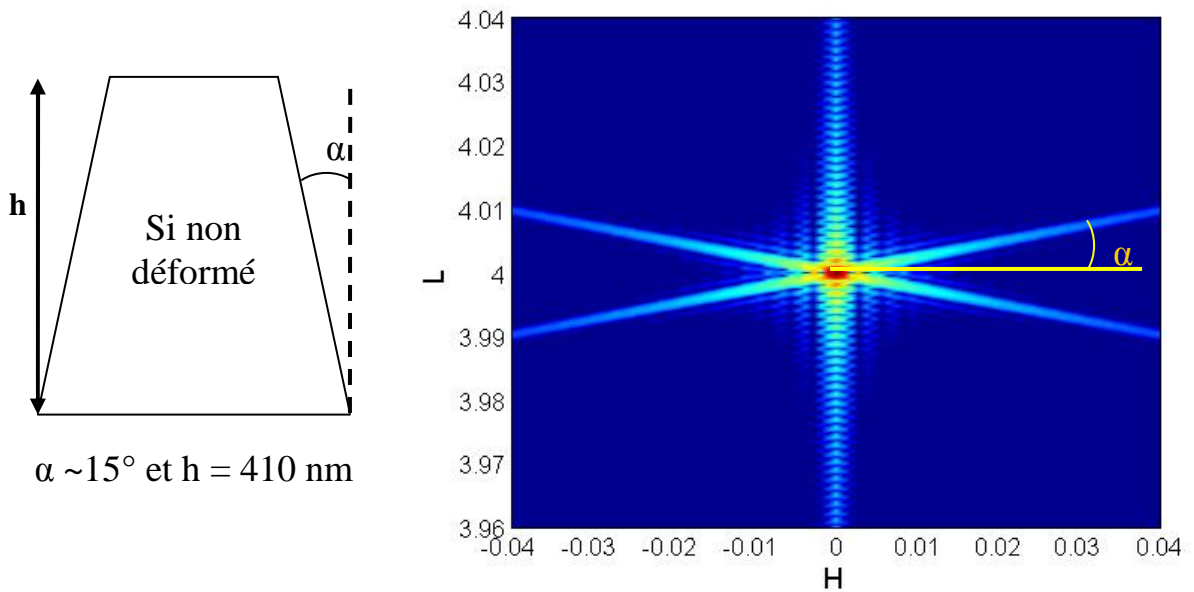


Figure III- 8: Géométrie et cartographie symétrique 004 d'une ligne de silicium trapézoïdale non déformée

Si on considère la même ligne ayant subi cette fois-ci une déformation homogène $\epsilon_{xx} = -0,002$ et $\epsilon_{zz} = 0,004$, on obtient la cartographie asymétrique 404 suivante (Figure III- 9). On peut directement lire les valeurs des déformations sur la cartographie en appliquant les équations en (19). La cartographie est la même que la précédente mais légèrement décalée vers des valeurs plus faibles de L et plus grandes de H, ce qui est en accord avec les commentaires faits en paragraphe 1.4.1.

$$\epsilon_{xx}^0 = \frac{-\Delta H}{H_{Si}} \quad \text{et} \quad \epsilon_{zz}^0 = \frac{-\Delta L}{L_{Si}} \quad (19)$$

Avec ΔH et ΔL le décalage du pic de diffraction par rapport à leurs positions non déformé (H_{Si} et L_{Si})

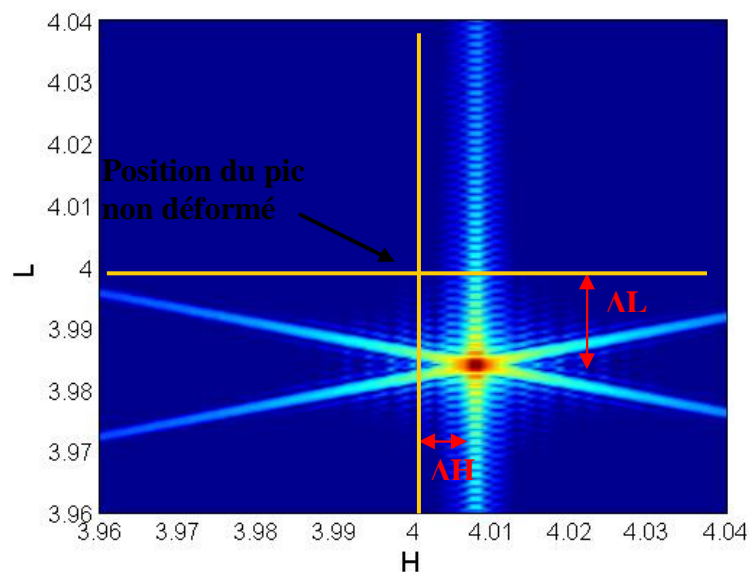


Figure III- 9: Cartographie asymétrique 404 d'une ligne de silicium trapézoïdale déformée de manière homogène

2. Mesures expérimentales

2.1 Acquisition des cartographies de l'espace réciproque

La Figure III- 10 représente les 4 degrés de liberté permettant de faire les réglages. L'angle ω est l'angle d'incidence du faisceau de rayons X sur l'échantillon, l'angle 2θ est l'angle formé entre le faisceau incident et le faisceau diffracté et φ est l'angle de rotation autour de la normale à la surface de l'échantillon. Enfin ψ est l'angle de rotation autour de l'axe perpendiculaire à la normale et appartenant au plan de diffraction.

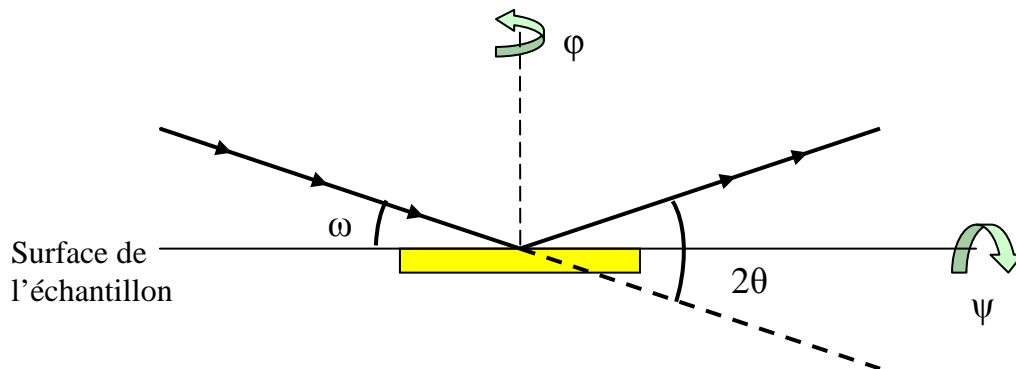


Figure III- 10: Schéma représentant les 4 angles de rotation de l'échantillon.

On peut balayer l'espace réciproque en faisant varier ces angles. La Figure III- 11 représente les balayages angulaires les plus courants. Un balayage en ω est appelé une 'rocking-curve' : l'angle entre le faisceau diffracté et le faisceau incident est maintenu constant. L'échantillon se balance (rock) donc autour d'une position centrale.

Si l'on balaye en ω avec une vitesse deux fois plus faible que la vitesse de balayage en 2θ , le balayage $\omega / 2\theta$ correspondant est radial dans le réseau réciproque. Les balayages ω sont perpendiculaires aux balayages $\omega / 2\theta$.

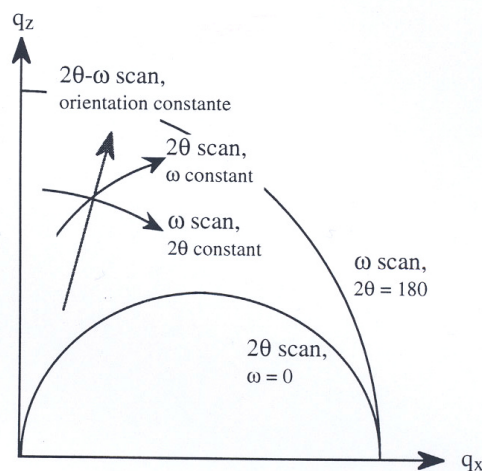


Figure III- 11: Différents types de balayages pour l'acquisition de spectres de diffraction représentés dans l'espace réciproque.

Selon les logiciels d'acquisition, il est également possible de balayer directement l'espace réciproque dans les directions des vecteurs de diffusion \vec{q}_x et \vec{q}_z . Le lien entre les composantes q_x et q_z et les angles ω et θ est donné dans les équations (20) et (21). Si les pas des balayages sont constants dans l'espace réciproque, les variations angulaires ne sont plus régulières.

$$q_x = \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta) \sin(\theta - \omega) \quad (20)$$

$$q_z = \frac{4\pi}{\lambda} \sin(\theta) \cos(\theta - \omega) \quad (21)$$

Dans notre cas, les mesures expérimentales doivent être très précises dans l'espace réciproque. L'utilisation d'un détecteur 2D ou linéaire pour l'acquisition des cartographies est donc difficile dans le cas d'un appareil commercial, où la distance échantillon-détecteur est limitée. Dans le cas d'une acquisition point par point, il faut donc définir deux séries de balayages à partir desquels sera tracée la cartographie. Selon le choix de ces balayages, la cartographie dans le réseau réciproque n'aura pas nécessairement une forme rectangulaire. Deux types de cartographies ont été réalisés :

- symétrique : autour de la raie 004 du silicium (réflexion la plus intense)
- asymétrique : raies 224 ou 404 selon l'orientation des réseaux

2.2 Montages expérimentaux

2.2.1 Mesures en laboratoire

Le diffractomètre utilisé pour faire les mesures de diffraction X Haute-Résolution en laboratoire est un X'PERT MRD de la société PanAlytical (Figure III- 12). C'est un diffractomètre 4 cercles, ce qui signifie qu'il dispose de quatre degrés de liberté (angles ω , 2θ , φ et ψ). Le rayon de la platine porte échantillon fait 320 mm. Le pas minimum en ω et 2θ , est de $0,0001^\circ$ soit 0,36 arcsec, avec une reproductibilité de $\pm 0,0001^\circ$.

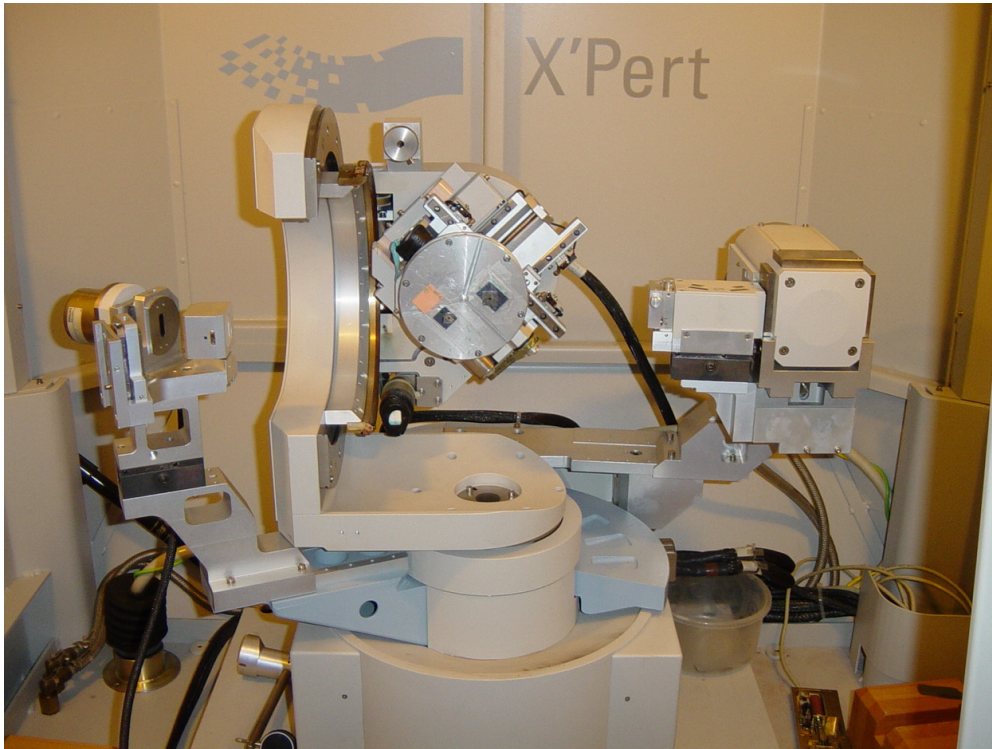


Figure III- 12: Photographie du diffractomètre 4 cercles X'pert MRD de Panalytical.

Deux configurations différentes ont été utilisées en laboratoire, choisies selon la période des échantillons mesurés. La Figure III- 13 représente schématiquement le cheminement du faisceau au travers des différentes parties de l'instrument pour les 2 configurations disponibles. Le choix se fait au niveau de l'optique d'entrée, entre un monochromateur Dumond-Bartels et une optique dite hybride.

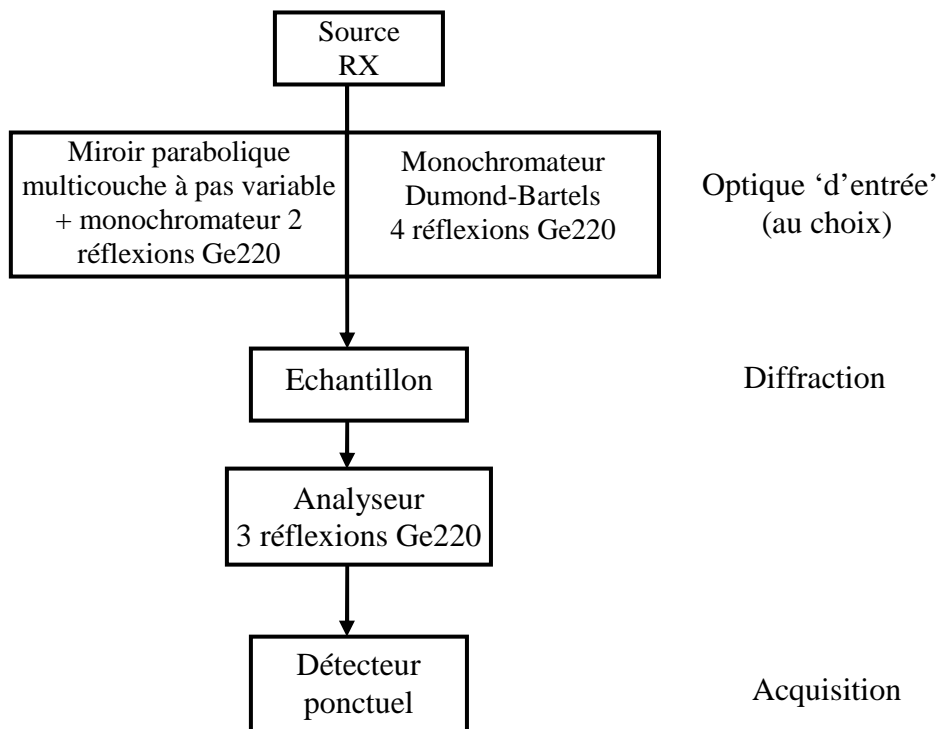


Figure III- 13: Représentation schématique du goniomètre en suivant le cheminement du faisceau.

- La source de rayons X:

Les électrons sont extraits d'un filament de tungstène, ils sont accélérés par une tension électrique dans un tube sous vide et vont bombarder une cible métallique (anode). Par ailleurs, l'éjection des électrons des couches profondes de l'anode provoque l'émission d'un rayonnement de fluorescence (raies $K_{\alpha_1}, K_{\alpha_2}, K_{\beta} \dots$). Dans cette étude nous avons utilisé un tube à anode en cuivre excité à une puissance 40 kV-40 mA. La longueur d'onde du cuivre K_{α_1} vaut $\lambda=0,1540598$ nm.

- Optique d'entrée :

Comme indiqué sur la Figure III- 13, les 2 optiques disponibles sont un monochromateur Dumond-Bartels 4 réflexions Ge220 et une optique hybride constituée d'un miroir parabolique multicouche à pas variable en amont d'un monochromateur à 2 réflexions Ge220. Examinons les différentes configurations possibles avec des réflexions sur des monocristaux.

Les propriétés d'une succession de deux cristaux ont été discutées par Laue [Lau37]. En supposant un réglage où les deux cristaux sont parallèles, la configuration est dite non dispersive et est appelée aussi (+ -) [DuM37]. Le signe donne le sens de rotation du faisceau, ce qui signifie que chaque cristal fait tourner le faisceau dans un sens opposé. Le diagramme de DuMond (Figure III- 14) montre l'évolution de la longueur d'onde λ en fonction de l'angle θ suivant la loi de Bragg. Si les deux cristaux sont parallèles, les courbes se superposent. Cela signifie que le second cristal accepte toutes les longueurs d'ondes réfléchies par le premier cristal. Dans ce cas, la bande passante de la radiation utilisée pour l'expérience dépend de la largeur des fentes placées entre le monochromateur et l'échantillon. Il est à noter que si le deuxième cristal n'est pas bien parallèle au premier, la transmission est fortement diminuée (les deux courbes ne sont plus superposées).

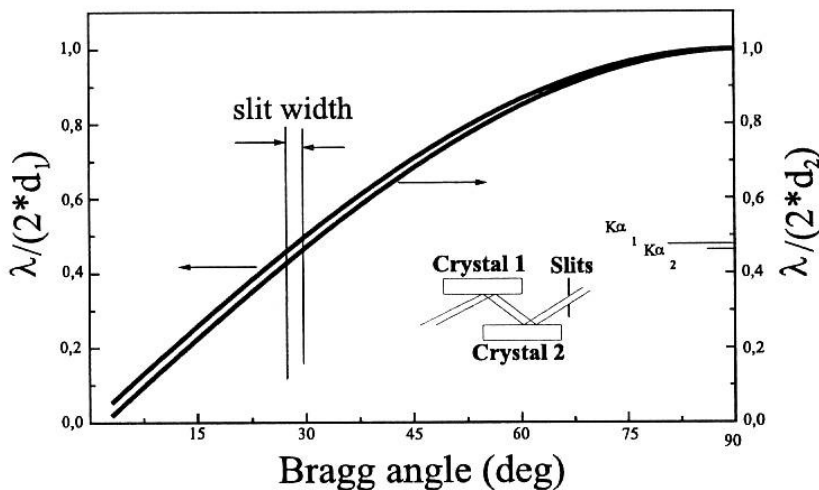


Figure III- 14: Diagramme de DuMond pour une configuration non dispersive d'un double cristal [Hol99].

Cependant, si le faisceau est collimaté avant le passage sur les deux cristaux, cet arrangement permet de sélectionner une longueur d'onde. C'est le cas de l'optique hybride composé d'un miroir parabolique multicouche à pas variable avec un monochromateur à 2 réflexions. L'utilisation d'un miroir parabolique multicouche à pas variable placé avant le

monochromateur permet de collimater le flux de rayons X sortant du tube. La source de rayons X émet dans toutes les directions, les faisceaux qui sortent du tube sont donc très divergents. Le miroir permet de récupérer une plus grande quantité des faisceaux produits par la source en les rendant parallèles. La Figure III- 15 représente schématiquement le fonctionnement du miroir.

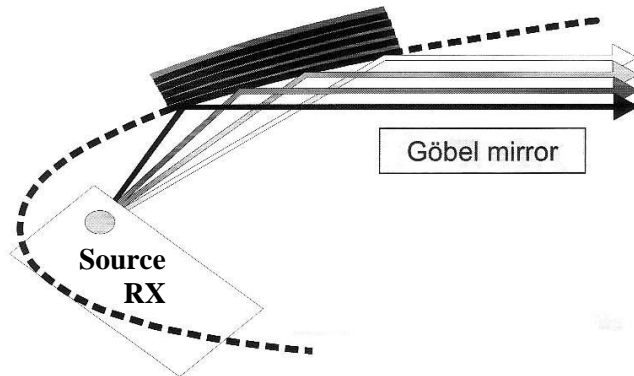


Figure III- 15: Fonctionnement du miroir courbe avec la source RX [Pie06].

Une autre possibilité existe pour positionner les cristaux, il s'agit de l'arrangement dispersif ou encore appelé (+ +) [DuM37] car les cristaux font tourner le faisceau dans le même sens. Les cristaux sont dans ce cas placés de manière anti-parallèle. Les courbes des deux cristaux sur le diagramme de Dumond (Figure III- 16) ont des directions opposées. Le recouvrement des deux courbes se fait sur un intervalle de longueur d'onde très petit. On peut ainsi régler le deuxième pour ne laisser passer que la longueur d'onde voulue. Toutes les autres ne respecteront plus la condition de Bragg et ne seront pas réfléchies. C'est le montage qui permet d'avoir le faisceau le plus monochromatique (par rapport au non-dispersif) et permet aussi de collimater le faisceau.

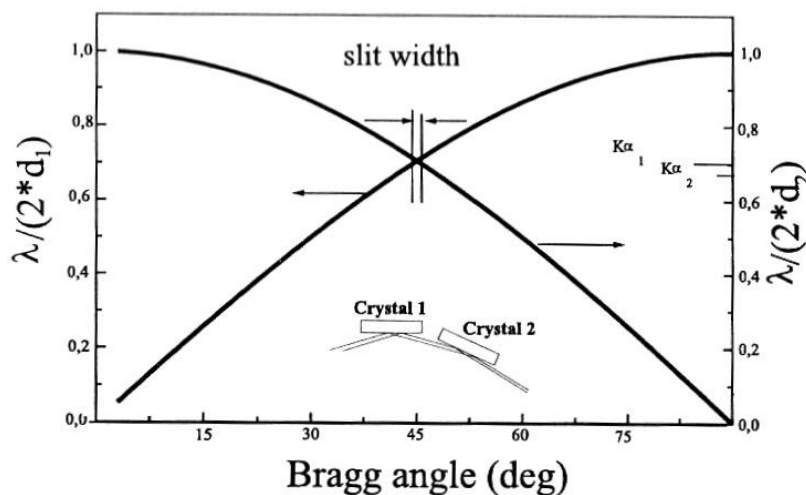


Figure III- 16: Diagramme de DuMond pour une configuration dispersive d'un double cristal [Hol99].

L'optique Dumond-Bartels implique 4 réflexions sur des monocristaux de Ge 220 placés de façon symétrique. La Figure III- 17 représente cette optique avec le cheminement du faisceau vue de dessus. Cet arrangement est de type (+ - - +), il s'agit donc d'une succession de

configuration non-dispersive, dispersive et enfin non dispersive. Il permet d'avoir un faisceau très monochromatique et parallèle, sa divergence en sortie est de 12 arcsec, ce qui permet d'obtenir une très bonne résolution dans l'espace réciproque. Avec ce type d'optique, l'artefact du monochromateur sur les cartographies devient presque invisible (voir remarque fin du paragraphe suivant [Few89]). La configuration utilisant ce monochromateur a été employée pour les échantillons de périodes plus élevées (580 nm et 2 μm) car à ces périodes, les satellites dans l'espace réciproque sont plus rapprochés, ce qui nécessite une meilleure résolution.

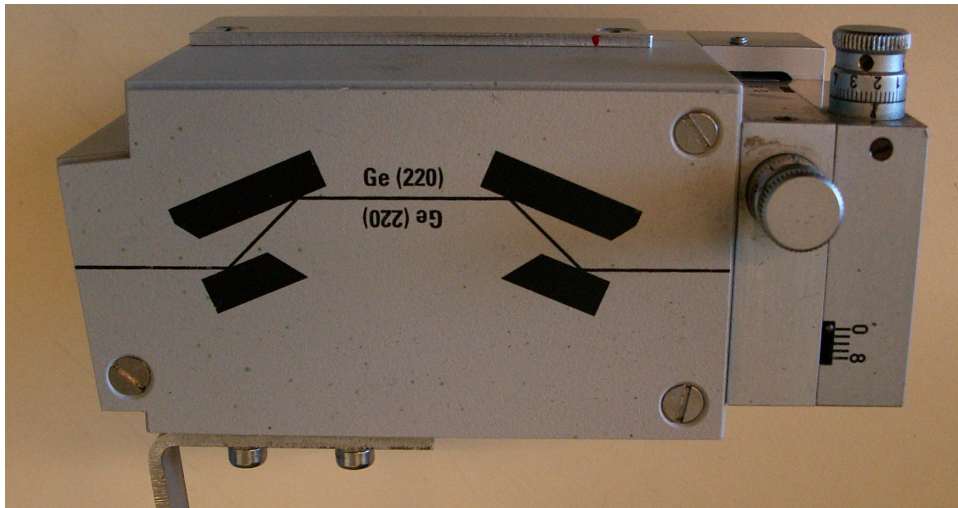


Figure III- 17: Photographie du boîtier du monochromateur Dumond-Bartels avec des fentes croisées en sortie.

L'emploi de l'optique hybride permet d'obtenir plus d'intensité que l'optique Dumond-Bartels mais au détriment de la largeur des satellites (car seulement 2 réflexions). Cette configuration a donc été utilisée pour les échantillons de plus petite période. Quand la période diminue, les satellites sont plus éloignés, la perte de résolution n'est donc pas trop problématique. Par contre, pour obtenir le même nombre de satellites que pour une structure de période plus importante, il faut mesurer des cartographies de l'espace réciproque plus grandes. L'intensité diffractée devient alors beaucoup plus faible, ainsi le gain de flux d'un facteur 20 par rapport au monochromateur Dumond-Bartels est nécessaire pour avoir un bon rapport signal/bruit sur l'ensemble de la cartographie.

Pour comparaison, la largeur à mi-hauteur du pic de diffraction du substrat de silicium est de $0,0045^\circ$ avec un optique Dumond-Bartels alors qu'elle est de $0,0074^\circ$ pour l'optique hybride.

- Analyseur 3 réflexions Ge220 :

Le détecteur intègre les signaux diffractés par l'échantillon sur tous les angles couverts par son ouverture. L'utilisation d'un analyseur positionné entre l'échantillon et le détecteur permet de diminuer l'angle d'acceptance. On a alors une meilleure précision sur l'angle 2θ . Ce type d'analyseur rend presque invisible l'artefact de l'analyseur sur les mesures expérimentales (voir remarque à la fin du paragraphe suivant [Few89]).

2.2.2 Mesures en rayonnement synchrotron (ESRF BM 32)

Durant ce travail de thèse, des mesures ont également pu être effectuées à l'ESRF (European Synchrotron Radiation Facility) sur la ligne BM 32. Le montage utilisait un monochromateur focalisant à 2 réflexions Si (111) avec un miroir collimatant et focalisant respectivement avant et après le monochromateur ainsi qu'un analyseur 3 réflexions Si (111). Les mesures ont été faites à une énergie de 8 keV avec un faisceau de $\sim 500\mu\text{m}$. Les Figures III-18 et III-19 montrent respectivement le diffractomètre de l'expérience et un schéma avec les différentes parties de la ligne BM 32.

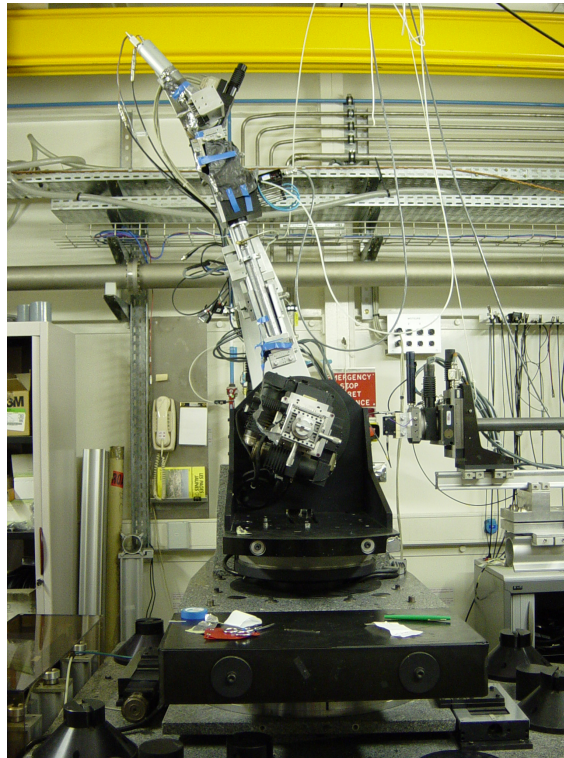


Figure III- 18: Diffractomètre de l'expérience sur la ligne BM 32 à l'ESRF.

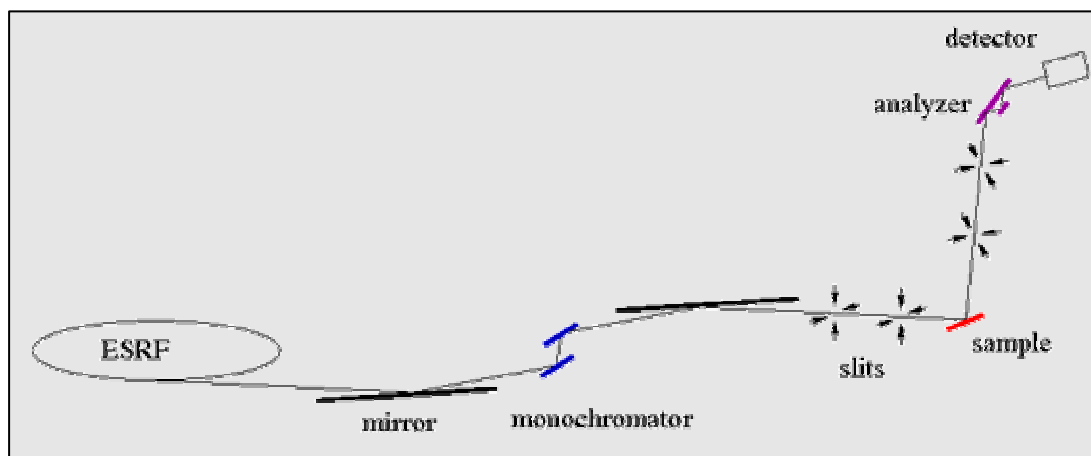


Figure III- 19: Schéma représentant les différentes parties du montage de la ligne BM 32 à l'ESRF.

Remarque sur l'influence des optiques sur les mesures expérimentales :

Lors de l'acquisition des cartographies, le monochromateur et l'analyseur utilisés pour les mesures peuvent former des signatures caractéristiques sur les cartographies du réseau réciproque (traînées) [Zau82]. La Figure III- 20 montre l'origine de ces traces dans l'espace réciproque. On observe trois traces traversant la cartographie. La trace A est due à l'analyseur, tandis que la trace M est liée au monochromateur. La dernière trace visible (E) n'est pas due aux optiques mais provient de la dispersion en énergie du faisceau. Cette trace est dirigée vers l'origine du réseau réciproque. La Figure III- 21 montre la cartographie très rapprochée des raies 004 et 224 autour du pic de diffraction du substrat de silicium pour les différents montages utilisés lors de ces travaux.

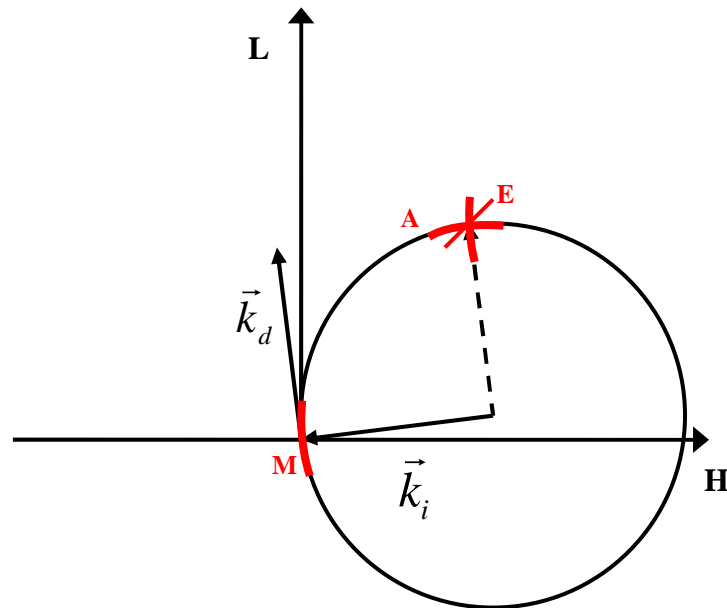
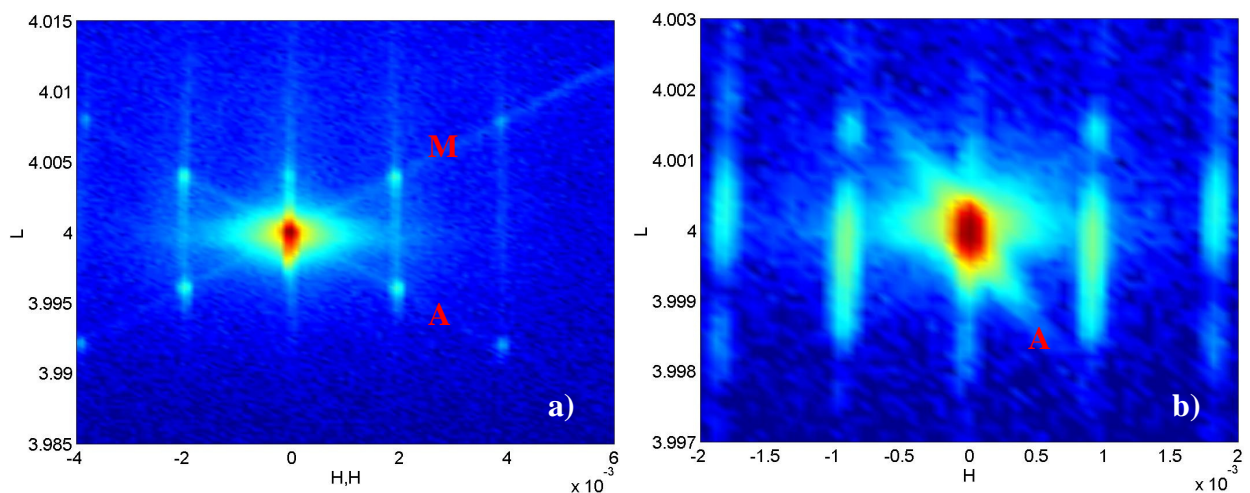


Figure III- 20: Schéma montrant l'origine des signatures du monochromateur (M), de l'analyseur (A) et de la dispersion énergétique (E).



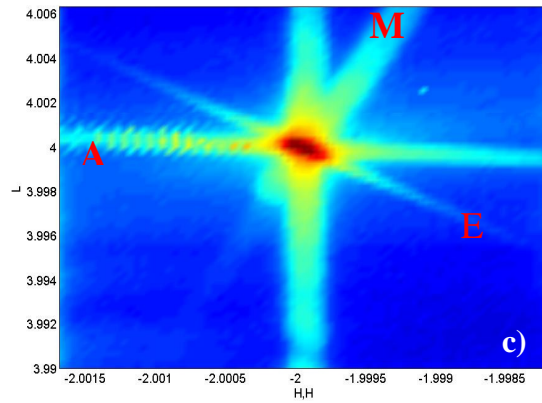


Figure III- 21: Agrandissement d'un pic substrat pour les raies 004 (a et b) et 224 (c) du silicium avec les traces du monochromateur (M), de l'analyseur (A) et de la dispersion énergétique (E). a) montage laboratoire avec optique hybride ; b) montage laboratoire avec monochromateur Dumond-Bartels ; c) montage ESRF sur ligne BM 32.

On remarque que les traces étaient plus visibles sur les mesures faites à l'ESRF (Figure III- 21c) par rapport à celles du montage en laboratoire (Figure III- 21a et b). Cela est en partie dû aux optiques qui étaient différentes de celles du laboratoire mais également à cause de la grande brillance du faisceau (voir paragraphe suivant). On voit aussi que l'optique Dumond-Bartels élimine complètement la trace du monochromateur, ce qui n'est pas le cas avec l'optique hybride.

2.2.3 Présentation et fonctionnement d'un synchrotron

L'intérêt du rayonnement synchrotron est son exceptionnelle brillance (photons/seconde/milliradian²/millimètre² pour $\frac{\delta\lambda}{\lambda} = 0.1\%$). La brillance à l'ESRF est de l'ordre de 10^{20} . La Figure III- 22 montre l'évolution de la brillance des sources de rayons X en fonction du temps. Le prochain des synchrotrons de 3ème génération ouvrira en 2009 à Hambourg et s'appellera Petra III. Il utilisera un anneau de stockage de 2,3 km. Les synchrotrons de 4ème génération sont appelés XFEL (X-ray Free Electron Laser ou laser à électrons libres), le premier d'entre eux ouvrira également à Hambourg, en 2013.

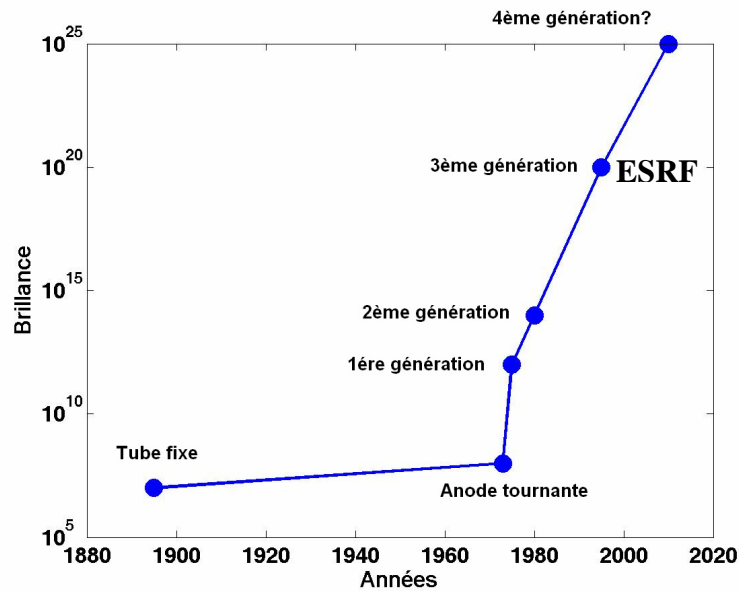


Figure III- 22: Evolution de la brillance des sources de rayons X en fonction du temps.

Les valeurs numériques données dans ce paragraphe s’appliquent à l’ESRF uniquement.

Des électrons, émis par un canon à électrons, sont d'abord accélérés dans un accélérateur linéaire (linac) puis transférés dans un accélérateur circulaire (booster synchrotron) jusqu'à ce qu'ils atteignent une énergie de 6 milliards d'électronvolts (6 GeV). Ils sont alors envoyés dans l'anneau de stockage, de 844 mètres de circonférence, dans lequel ils tournent à énergie constante pendant des heures à l'intérieur d'une chambre à vide. Actuellement, 40 lignes de lumière se trouvent le long de l'anneau. La Figure III- 23 montre les différentes parties d'un synchrotron.

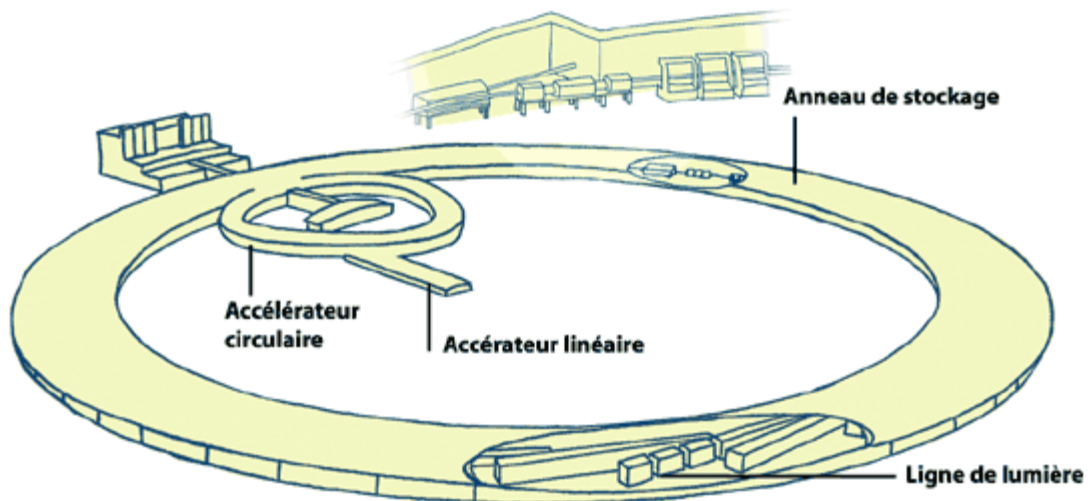


Figure III- 23: Schéma représentant les différentes parties d'un synchrotron [ESR1].

L'anneau de stockage est constitué de sections courbes (aimants de courbure) et de sections droites (entre deux aimants de courbure). La trajectoire des électrons est définie par les champs magnétiques qu'ils traversent. On distingue plusieurs types d'aimants : les aimants de courbure, les onduleurs et les aimants de focalisations. Leurs positions sur l'anneau de stockage sont précisées sur la Figure III- 24.

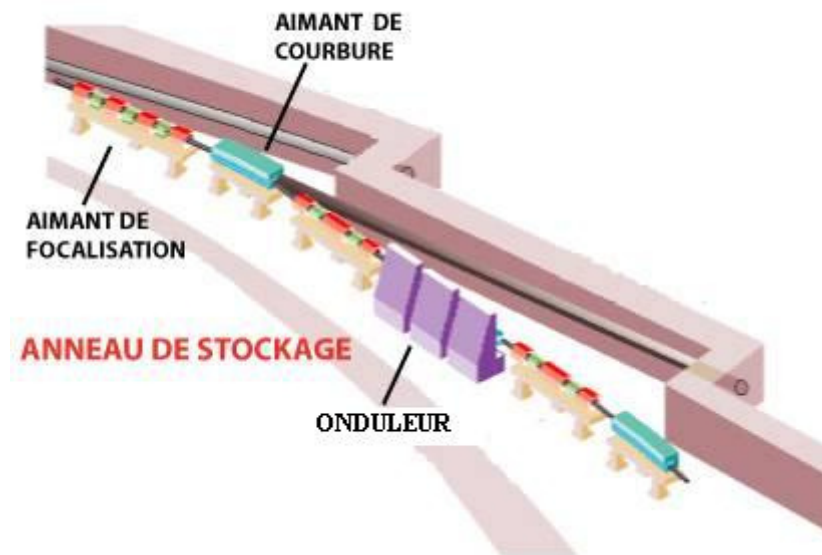


Figure III- 24: Position sur l'anneau des différents aimants [ESR2].

- Les aimants de courbure :

Lorsqu'ils passent dans ces aimants, les électrons sont déviés de plusieurs degrés et décrivent ainsi une trajectoire courbe. Cette déviation conduit les électrons à émettre de la lumière synchrotron. La ligne de lumière BM 32 se situe après un aimant de courbure.

- Les onduleurs :

Ces structures magnétiques formées de petits aimants juxtaposés forcent les électrons à suivre une trajectoire ondulée. Les cônes de lumière émis à chaque courbure se superposent, constituant ainsi un faisceau lumière beaucoup plus intense et concentré qu'à la sortie d'un aimant de courbure.

- Les aimants de focalisation :

Ces aimants, disposés sur les sections droites de l'anneau de stockage, sont utilisés pour concentrer le faisceau d'électrons afin de le rendre le plus fin possible. Un faisceau d'électrons d'une telle finesse permet de produire des rayons X extrêmement brillants.

2.2.4 Intérêt des mesures en rayonnement synchrotron

D'un point de vue expérimental, le gain en brillance du rayonnement synchrotron a plusieurs avantages. Dans un premier temps, le flux de rayons X étant beaucoup plus élevé, le rapport signal/bruit devient nettement meilleur. A titre de comparaison le Tableau III- 1 donne les intensités en coups par seconde du pic substrat du silicium pour une raie 004 dans le cas des différents montages utilisés lors de ces travaux.

	Montage Laboratoire		Montage ESRF
	Optique Bartels	Optique Hybride	
Intensité (cps)	4 à $5 \cdot 10^4$	6 à $8 \cdot 10^5$	$10^8/10^9$

Tableau III- 1: Intensité en coups par seconde du pic substrat du silicium pour une raie 004 pour les montages en laboratoire et le montage ESRF

Les temps d'acquisition peuvent également être réduits. Cependant, le détecteur étant un détecteur ponctuel tout comme le montage en laboratoire, le temps de déplacement entre 2 points de mesure (de l'ordre de 0,5 s) devient rapidement tout aussi important que le temps de mesure. L'avantage le plus intéressant n'est donc pas le gain de temps mais la possibilité de faire des cartographies de l'espace réciproque beaucoup plus grandes. En effet, comme l'intensité des satellites décroît rapidement lorsque l'on s'écarte du pic de Bragg, le nombre de satellites que l'on peut mesurer en laboratoire est limité, le rapport signal sur bruit devient rapidement très faible, même avec l'optique hybride. Ainsi la Figure III- 25 montre une cartographie 004 d'un échantillon de période 200 nm mesuré avec l'optique hybride.

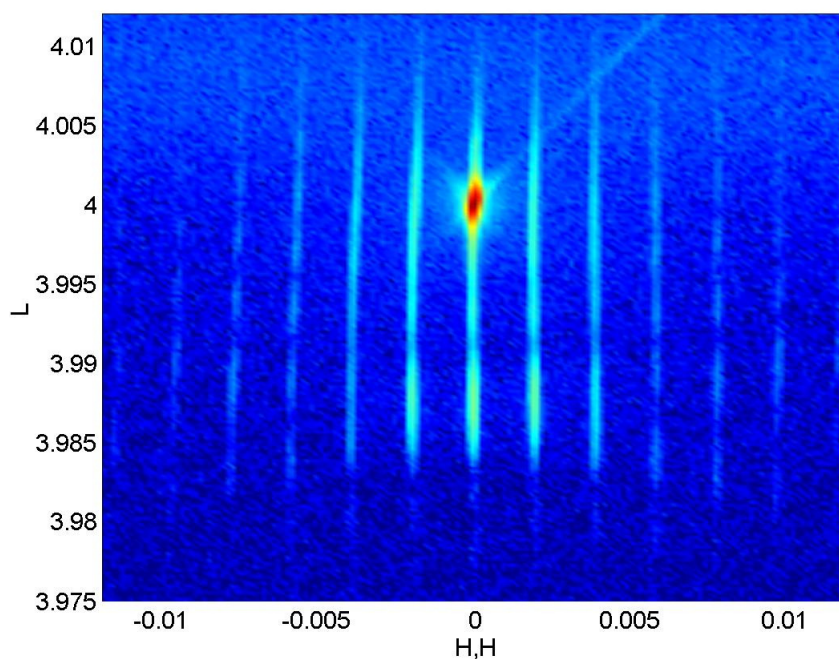


Figure III- 25: Cartographie 004 d'un échantillon de période 200 nm mesuré avec l'optique hybride.

Grâce à la brillance du synchrotron, on peut mesurer des cartographies plus grandes. La Figure III- 26 montre une cartographie 004 mesurée à l'ESRF sur le même échantillon que celui de la cartographie de la Figure III- 25, on voit que l'on a accès à une plus grande partie de l'enveloppe diffractée par l'échantillon (cinq fois plus larges suivant la direction H,H). Or, c'est l'intensité de l'enveloppe qui contient l'information sur les déformations locales. A l'aide d'une telle cartographie, on peut potentiellement remonter aux déformations locales avec une très grande résolution.

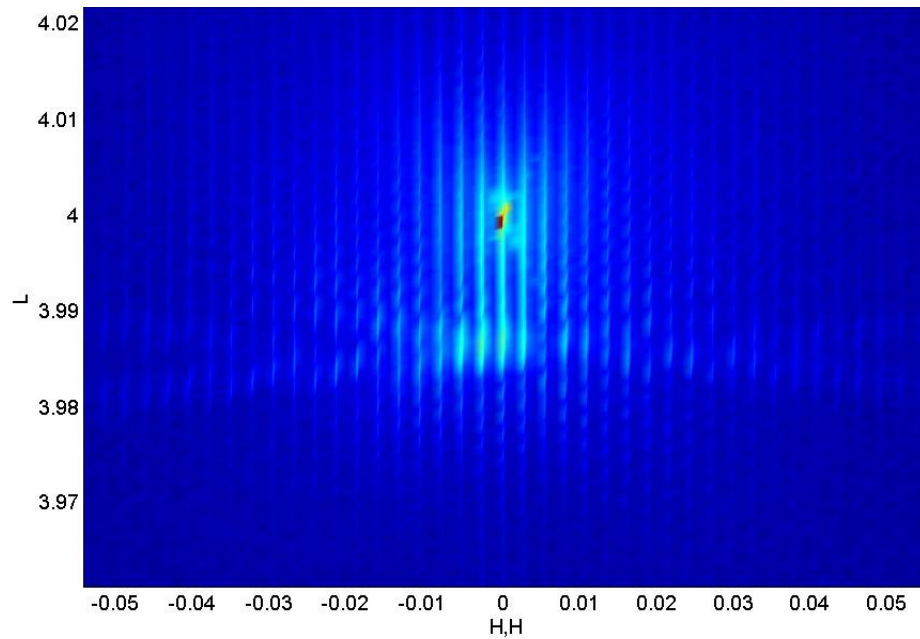


Figure III- 26: Cartographie 004 d'un échantillon de période 200 nm mesuré à l'ESRF (même échantillon que la Figure III- 25 avec une échelle 1,5 fois plus grande en L et 5 fois plus grande suivant H,H).

2.3 La préparation des échantillons

Les échantillons sont des réseaux de lignes de Silicium de 2 mm de long, parfaitement périodiques sur une largeur de 2 mm. Pour des raisons de gain de place, plusieurs structures sont ainsi réalisées sur une même zone de la plaquette de Silicium espacées de $\sim 100\mu\text{m}$ entre elles. La Figure III- 27 montre la position des structures sur les plaquettes de silicium. On remarquera sur la photographie de droite que les structures ont été fabriquées suivant deux orientations cristallographiques à 45° .

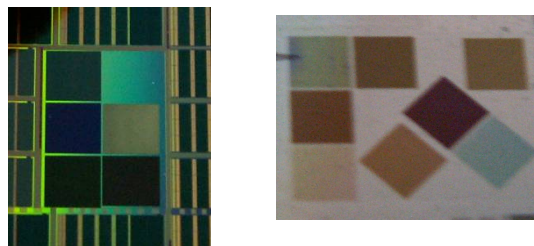


Figure III- 27: Photographies des structures étudiées, de période 200 nm, 300 nm et 580 nm (gauche) et de période 580 nm et $2\mu\text{m}$ (droite).

Du fait de la petite taille de ces structures et de leur proximité, il s'avère donc nécessaire de les isoler pour les mesurer séparément. En effet, le signal diffracté par les structures les plus proches ne doit pas interférer avec le signal de la structure mesurée. Pour cela, plusieurs méthodes de préparation ont été testées :

- Par clivage de la plaque suivant les plans denses du silicium, mais cette méthode est uniquement possible pour les structures dont les lignes sont orientées [110] et s'avère délicate à cause de la proximité des structures.

- Par découpe à la scie à fil diamanté. Cette méthode peut poser des problèmes car la coupe du silicium échauffe et endommage parfois les échantillons si celle-ci est faite trop près des structures à mesurer. Cela influence alors directement la diffraction (Figure III- 28a), on voit l'apparition d'une tâche diffuse autour du pic de Silicium. Les satellites liés à la périodicité ne sont plus visibles, or ce sont eux qui contiennent l'information sur les contraintes locales.
- Au lieu de séparer physiquement les structures, une autre technique consiste à n'enregistrer que l'intensité diffractée par la zone de l'échantillon qui nous intéresse. Pour cela, on pose sur la structure un masque fait d'un matériau absorbant les rayons X aux énergies auxquelles on travaille. L'épaisseur doit suffire pour stopper les rayons X autour de la structure à mesurer tout en gardant une tenue mécanique correcte. L'épaisseur choisie est de 100 μm . On voit sur la Figure III- 28b que toute l'information est conservée sur la cartographie de diffraction.

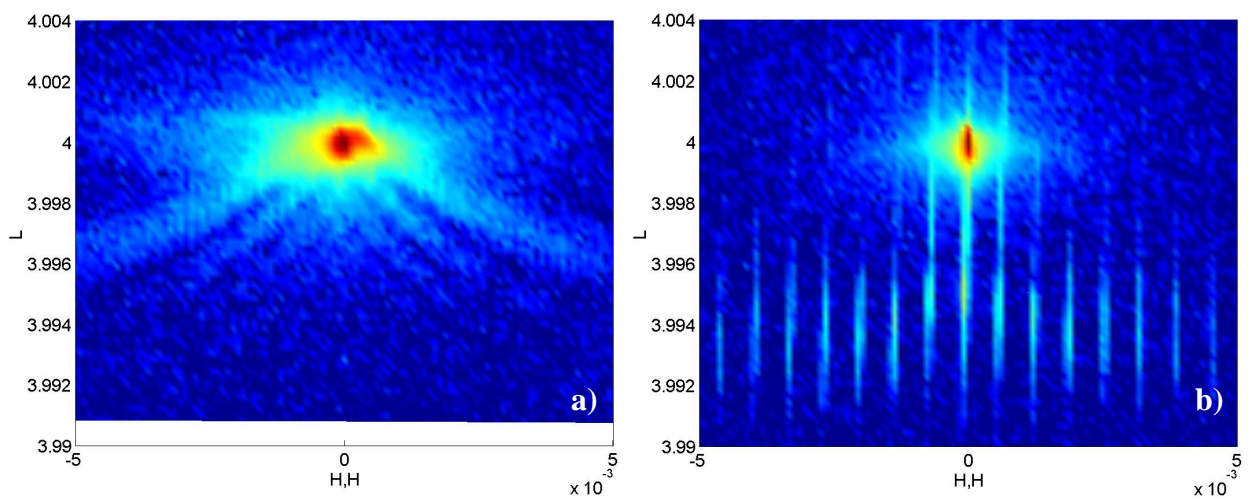


Figure III- 28: Cartographies de l'espace réciproque de la raie 004 du Si, pour le même échantillon (période 580 nm avec tranchées de 240 nm) préparé, soit par découpe (a) soit par pose d'un masque en Mo (b).

L'utilisation d'un masque est devenue la méthode usuelle de préparation quelque soit l'échantillon, car elle est non destructive et plus facile à mettre en œuvre. Deux matériaux ont été utilisés pour la réalisation des masques : le Molybdène (Mo) et l'inox. De nombreuses mesures ont été réalisées avec le Mo, cependant il arrivait qu'une zone de diffraction diffuse apparaisse à un angle supérieur à l'angle de Bragg du silicium (voir le haut de la Figure III- 29). Ce signal a été identifié comme provenant de la diffraction de l'oxyde MoO_3 ($2\theta=69,24^\circ$). Cela n'a posé aucun problème pour la grande majorité des mesures dont la diffraction se produisait à des angles différents.

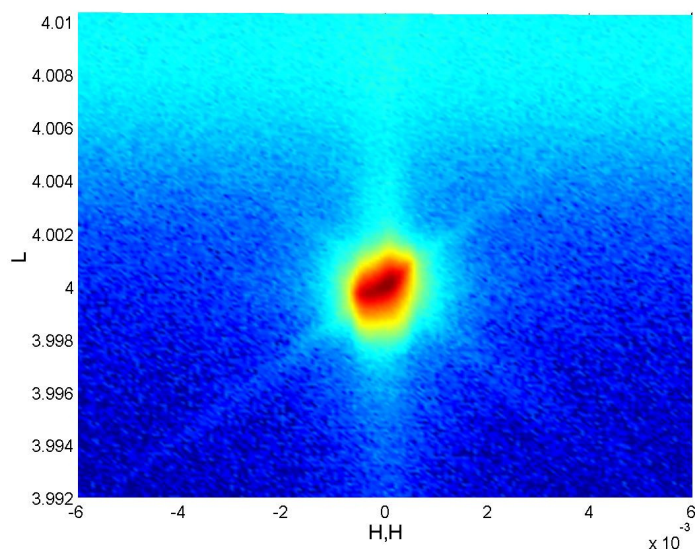


Figure III- 29: Cartographie 004 montrant le pic de Bragg du silicium (001) et la diffusion de MoO₃ visible en partie haute.

Pour les mesures de raies symétriques 004, l'ouverture du masque a la taille exacte des structures (2*2 mm). Pour les raies asymétriques 224 et 404, l'angle d'incidence étant faible (8-9°), celle-ci doit être plus large dans la direction parallèle au faisceau pour compenser l'effet d'ombre dû à l'épaisseur du masque. Un schéma explicatif est donné en Figure III- 30.

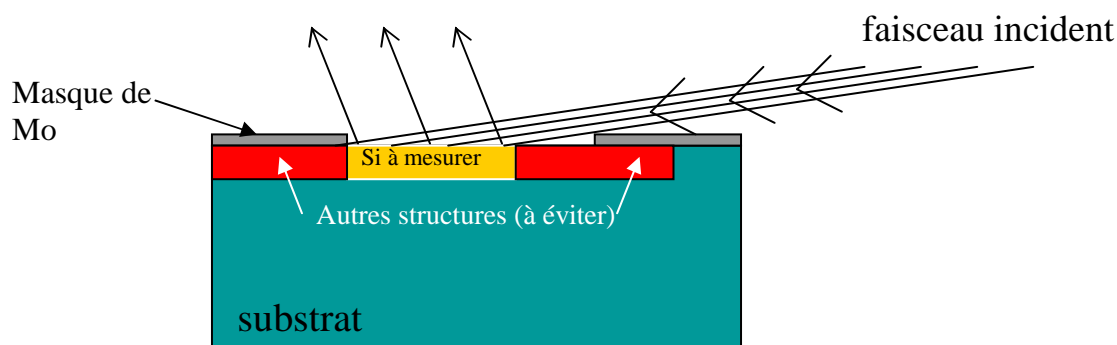


Figure III- 30: Schéma explicatif du fonctionnement du masque appliqué à la diffraction d'une raie de diffraction asymétrique à faible angle d'incidence.

Quelle que soit la méthode de préparation, le morceau de plaquette est ensuite fixé sur une lame de verre elle-même accrochée à la platine porte échantillons. Deux méthodes de fixation ont été testées : la fixation au scotch double-face et la fixation à la cire. Les 2 méthodes fonctionnent correctement mais les effets de dérive sont moins fréquents avec la cire. Cette dérive se traduit sur la cartographie par des satellites qui ne sont plus droits à cause d'un déplacement très lent de l'échantillon. La fixation à la cire se montre donc plus stable dans le temps. Certains échantillons ont pu être remesurés sans problèmes plusieurs mois après leur fixation. Nous avons ainsi pu faire des mesures de répétabilité (voir paragraphe 4.3 de ce chapitre).

La méthode de préparation la plus fiable et qui est donc devenue la méthode standard pour ce type d'échantillon est de cliver la plaquette de silicium très largement autour de l'ensemble

des structures. Le morceau est ensuite fixé à la cire sur une lame de verre elle-même fixée avec du scotch sur le porte-échantillon du diffractomètre. On appose alors un masque en inox ou en molybdène sur le morceau de plaquette de manière à ce que l'ouverture du masque permette la diffraction d'une structure uniquement. De cette manière, les échantillons ne sont pas endommagés lors de la préparation et peuvent être conservés pour des mesures ultérieures, si nécessaire.

3. Simulation des cartographies de l'espace réciproque

3.1 Méthodologie

Si le champ de déformation est connu, la distribution d'intensité peut être déterminée par le biais des théories cinématiques ou dynamiques (méthodes indirectes) [Jam62, Pin78]. L'inverse n'est cependant pas possible directement car expérimentalement, on mesure l'intensité et non l'amplitude du signal. L'intensité est égale au module au carré de l'amplitude, il y a donc perte d'information sur la phase. Des techniques d'inversion pour retrouver ce terme de phase à l'aide d'algorithmes sont actuellement en développement pour le calcul des déformations locales (voir paragraphe II-3.4).

C'est pourquoi dans un premier temps, il est nécessaire de calculer le champ de déplacement (par FEM par exemple) puis de calculer l'intensité diffractée à partir de ces déplacements. L'accord entre l'intensité mesurée et celle calculée à partir du champ de déplacement simulé permet de valider le champ de déplacement utilisé pour les calculs. C'est cette approche que nous avons développée pour déterminer les déformations à l'échelle nanométrique.

Dans un premier temps, nous simulons le système à partir de la géométrie connue et calculons le champ de déplacement par la méthode des éléments finis (voir chapitre I-3). Une fois le déplacement connu dans l'ensemble de la structure, nous pouvons calculer l'intensité diffractée [She97, Kag02, Lou06, Gai07]. Le logiciel Femlab simule le champ de déplacement pour chaque nœud du maillage choisi pour la géométrie. Le logiciel Matlab, dont Femlab fait partie, a des fonctions spécifiques pour obtenir les informations calculées par Femlab. A l'aide de la fonction 'postinterp', les champs de déplacement pour chaque position atomique sont acquis (Equation 22) afin de les traiter numériquement sous forme de matrices :

$$\begin{aligned} & \text{postinterp}(\text{fem}, 'u', [\text{xx} * \text{coefFemlab}; \text{yy} * \text{coefFemlab}]) / \text{coefFemlab}; \\ & \text{postinterp}(\text{fem}, 'v', [\text{xx} * \text{coefFemlab}; \text{yy} * \text{coefFemlab}]) / \text{coefFemlab}; \end{aligned} \quad (22)$$

Avec 'u' le déplacement suivant la direction x, 'v' le déplacement suivant la direction y et [xx,yy] la liste des coordonnées des points pour lesquels nous voulons les valeurs de 'u' et 'v'. Ces points correspondent aux positions atomiques. Le logiciel Femlab n'utilisant pas d'unités, 'coefFemlab' est un coefficient permettant de se rapporter au mètre.

Comme les positions atomiques ne correspondent pas forcément à des nœuds du maillage, les valeurs sont automatiquement interpolées à partir des valeurs de déplacement des nœuds les plus proches. Afin de diminuer les tailles de matrice, et ainsi le temps de calcul, nous limitons le nombre d'atomes pris en compte dans le calcul. Seule une fraction des atomes, choisis à intervalle constant, est alors prise en compte pour le calcul d'intensité. L'intervalle entre les

atomes est choisi pour que la variation du champ de déplacement soit très faible à cette échelle ($<5 \cdot 10^{-5}$).

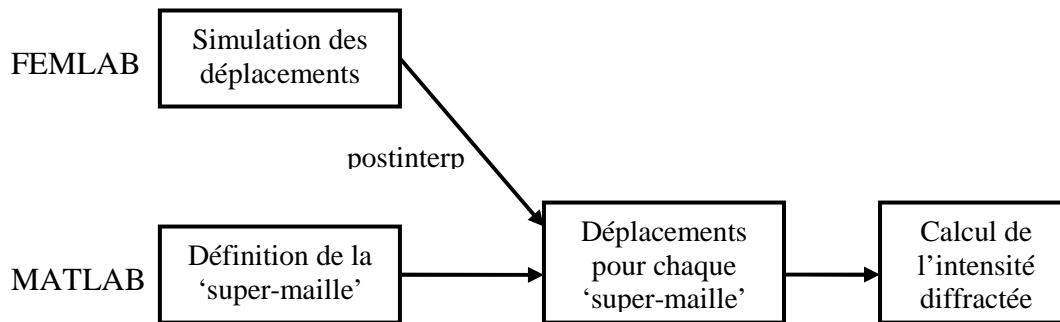


Figure III- 31: Schéma représentant les différentes étapes de la simulation d'une cartographie de l'espace réciproque.

Le calcul de l'intensité diffractée est détaillé dans le paragraphe suivant. D'autre part, la profondeur de substrat à considérer dans le calcul est également un paramètre important. En prenant peu de substrat, l'ensemble du silicium déformé ne sera peut-être pas simulé. En augmentant la profondeur utilisée dans le calcul, on s'affranchira de ce problème et l'on augmentera la précision des cartographies calculées par transformée de Fourier mais les temps de calcul seront évidemment plus longs (voir paragraphe 5.1 de ce chapitre sur la paramétrage du calcul de l'intensité diffractée).

3.2 Calcul de l'intensité diffractée

Deux approches ont été testées pour le calcul de la cartographie :

- ♦ La première consiste à calculer l'intensité diffractée par discrétisation du problème. C'est-à-dire que pour chaque point de l'espace réciproque, la contribution de chaque point de la structure étudiée est prise en compte (programme complet en Annexe 3). L'équation (23) montre la formule de calcul pour un point d'une cartographie 404 de l'espace réciproque. Ce calcul est donc répété pour chaque point de la cartographie. Le calcul est effectué sur une 'supermaille' définie à partir des facteurs N_x et N_z . Il est également à noter que le terme exponentiel dans l'expression de l'amplitude a été ici décomposé en une composante réelle (R) et une composante imaginaire (I) pour un gain de temps de calcul. On calcule l'intensité diffusée par chacune des 'supermailles' pour la matrice R puis la matrice I. Ces intensités sont ensuite toutes sommées ($R = \sum \sum R$ et $I = \sum \sum I$) avant d'obtenir l'intensité ($R^2 + I^2$)

$$R = A \frac{\sin(N_z \cdot a_{defzz} \cdot q_z / 2)}{\sin(a_{defzz} \cdot q_z / 2)} \cdot \frac{\sin(N_x \cdot a_{defxx} \cdot q_x / 2)}{\sin(a_{defxx} \cdot q_x / 2)} \cdot \cos(q_x \cdot r_x + q_z \cdot r_z)$$

$$R = \sum \sum R$$

$$I = A \frac{\sin(Nz \cdot a_{defzz} \cdot q_z / 2)}{\sin(a_{defzz} \cdot q_z / 2)} \cdot \frac{\sin(Nx \cdot a_{defxx} \cdot q_x / 2)}{\sin(a_{defxx} \cdot q_x / 2)} \cdot \sin(q_x \cdot r_x + q_z \cdot r_z)$$

$$I = \Sigma \Sigma I$$

$$\text{Intensité} = R^2 + I^2 \quad (23)$$

Avec A la densité électronique d'une période non déformée (correspond à $\rho(\vec{r})$ dans l'équation (16)), adefxx la position des 'supermailles' dans la direction x, adefzz la position des 'supermailles' dans la direction z et F004(l,k) l'intensité diffractée pour les coordonnées (l,k) de l'espace réciproque.

En utilisant cette méthode, l'intensité est calculée sans faire d'approximations mais l'utilisation de deux doubles boucles de calcul rend le programme très lent (plusieurs heures pour une cartographie)

- ◆ La seconde approche utilise un algorithme de FFT (Fast Fourier Transform) pour calculer la cartographie. Pour pouvoir utiliser cette méthode, l'amplitude doit pouvoir être écrite sous forme d'une transformée de Fourier. Dans le cas de petites déformations, cela est possible moyennant une petite approximation (voir Equation 16 dans le paragraphe 1.4.2 de ce chapitre).

$$A_{fft} = A \cdot e^{iq \cdot (rz - rx)}$$

Fourier = fft2 (Afft)

Amplitude = fftshift (Fourier)

Intensite = amplitude.*conj(amplitude); (24)

Avec rz et rx les déplacements suivant les directions z et x. A et Afft représentent respectivement $\rho(\vec{r})$ et $\rho_{def}(\vec{r})$ dans l'équation (16). La fonction 'fft2' est l'algorithme de calcul de la transformée de Fourier en 2 dimensions. La fonction 'fftshift' permet d'obtenir l'amplitude dans le bon ordre. Pour finir, on calcule l'intensité avec le module au carré de l'amplitude.

Cette technique a l'avantage de simplifier le calcul (voir programme en annexe 3) car elle permet d'obtenir toute la cartographie avec un seul calcul. Ainsi cette méthode a l'avantage d'être beaucoup plus rapide avec un temps de calcul de quelques secondes pour une cartographie.

La différence entre ces deux approches est d'autant plus importante que l'on s'écarte du pic du substrat du fait de l'approximation. Les calculs montrent que dans le cas de déformations assez faibles (ce qui est le cas ici), la différence entre les 2 approches est négligeable, la méthode de calcul par FFT a donc été privilégiée dans ces travaux pour le gain de temps.

4. Résultats expérimentaux :

4.1 Interprétation des cartographies de l'espace réciproque

Nous allons expliquer dans ce paragraphe comment exploiter les cartographies de l'espace réciproque. Pour cela, nous allons montrer différentes cartographies provenant d'échantillons de période décroissante, allant de $2\ \mu\text{m}$ à $200\ \text{nm}$, ce dernier étant représentatif de la technologie $90\ \text{nm}$ actuellement en cours de développement pour les parties mémoires.

La Figure III- 32 représente une cartographie du réseau réciproque autour de la réflexion symétrique 004 du silicium pour un échantillon de période $2\ \mu\text{m}$, la largeur des lignes de Si étant de $1\ \mu\text{m}$. La direction H représente la perpendiculaire aux lignes et la direction L représente la normale à la surface. Plusieurs informations peuvent être obtenues sur cette cartographie: Le pic intense central ou pic de Bragg, provient du substrat de Si non déformé. La cartographie montre également des satellites très rapprochés suivant la direction H. Comme nous l'avons expliqué, leur espacement est inversement proportionnel à la période de l'échantillon. Ces satellites se déplacent vers des valeurs plus faibles de L lorsque l'on s'écarte du pic de Bragg, ce qui signifie une déformation positive suivant la direction z. En effet une déformation de ce type va légèrement augmenter le paramètre de maille vertical du silicium qui se traduit par une diminution de l'angle de diffraction. Nous avons également effectué des mesures asymétriques sur ces échantillons (non représentées ici). Cependant, la résolution instrumentale nous empêche de séparer correctement les satellites mais il est clairement visible que l'enveloppe des satellites est décalée vers des valeurs plus grandes de H, ce qui signifie une compression suivant la direction x.

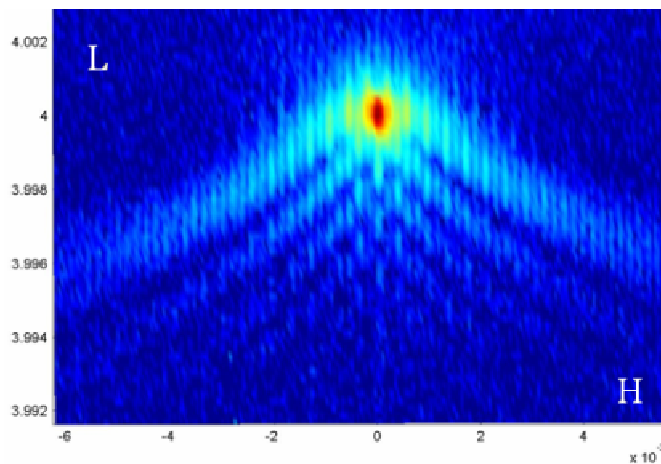


Figure III- 32: Cartographie symétrique 004 pour un échantillon de période $2\ \mu\text{m}$ ($p=2\ \mu\text{m}$, $b=1\ \mu\text{m}$, $h=410\text{nm}$).

Lorsque la période diminue il devient plus facile de distinguer les satellites. La Figure III- 33 représente une cartographie du réseau réciproque autour de la réflexion asymétrique 404 du silicium pour un échantillon de période $0,58\ \mu\text{m}$ avec une largeur de lignes de Si égale à $0,24\ \mu\text{m}$. A nouveau, le signal diffracté est décalé vers des valeurs plus faibles de L et plus grandes de H ce qui signifie à nouveau une déformation positive selon z et négative selon x. On remarque également une particularité sur cette cartographie: l'enveloppe des satellites forme un second pic, en plus du pic de Bragg. Ceci peut s'expliquer si le silicium est contraint

de façon homogène sur un espace suffisamment grand pour former un pic de diffraction distinct. On peut donc supposer que ce signal provient d'une zone déformée de manière homogène dans les lignes de silicium. Si cette hypothèse est correcte la position de ce pic permet d'obtenir une valeur de déformation moyenne sur la région active du silicium. Sur la Figure III- 33, la position du pic secondaire se trouve à $H=4,0067$ et $L=3,9938$, ce qui correspond à des valeurs de déformation $\epsilon_{xx} \approx -1,68 \cdot 10^{-3}$ et $\epsilon_{zz} \approx 1,54 \cdot 10^{-3}$ (voir le paragraphe III-4.3 pour la répétabilité des mesures)

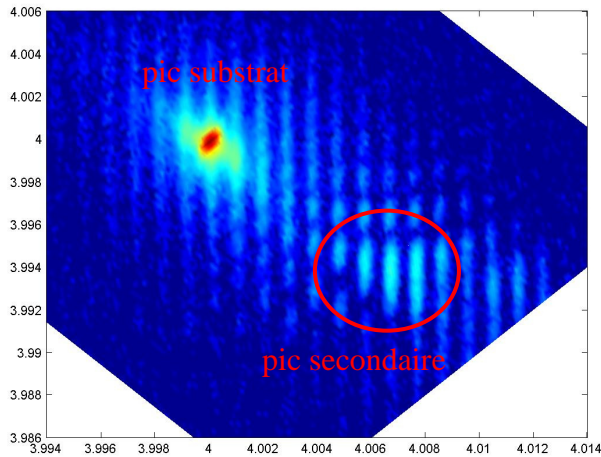


Figure III- 33: Cartographie asymétrique 404 pour un échantillon de période 580 nm avec mise en évidence du pic secondaire.

Des échantillons de période 200nm avec des lignes de Si de 90nm de large ont été également mesurés, à l'aide d'une source synchrotron (ESRF ligne BM32). Cette mesure est également possible en laboratoire mais à l'aide de la configuration utilisant le miroir parabolique à pas variable. (Paragraphe 2.1.1 de ce chapitre). On voit sur la Figure III- 34 que les satellites sont encore plus espacés, il a donc fallu réaliser des cartographies plus larges. L'intensité diffractée devient alors plus faible, ce qui justifie le passage du monochromateur Dumond-Bartels à l'optique Hybride. Comme pour les échantillons de période 580 nm, le signal est déplacé vers des valeurs plus faibles de L, ce qui signifie une déformation positive en z. Pour cette cartographie, il n'y a pas de décalage en H car il s'agit d'une cartographie symétrique. La Figure III- 34 (droite) montre un balayage suivant la direction L, extrait de la cartographie en H, $H=0$ (satellite qui contient le pic de Bragg). Un second pic de diffraction est clairement visible pour des valeurs plus faibles de L par rapport au substrat. La position de ce pic donne une déformation $\epsilon_{xx} \approx -2,9 \cdot 10^{-3}$ et $\epsilon_{zz} \approx 3,1 \cdot 10^{-3}$ (sur une cartographie 224).

Si l'on compare les valeurs extraites des mesures, on remarque une forte augmentation des déformations avec la diminution de la période. Cette augmentation provenant de la superposition du champ de déformation provenant des oxydes de remplissage entourant la ligne de Si. Cet effet est en accord avec les simulations mécaniques par éléments finis (paragraphe I-3.6)

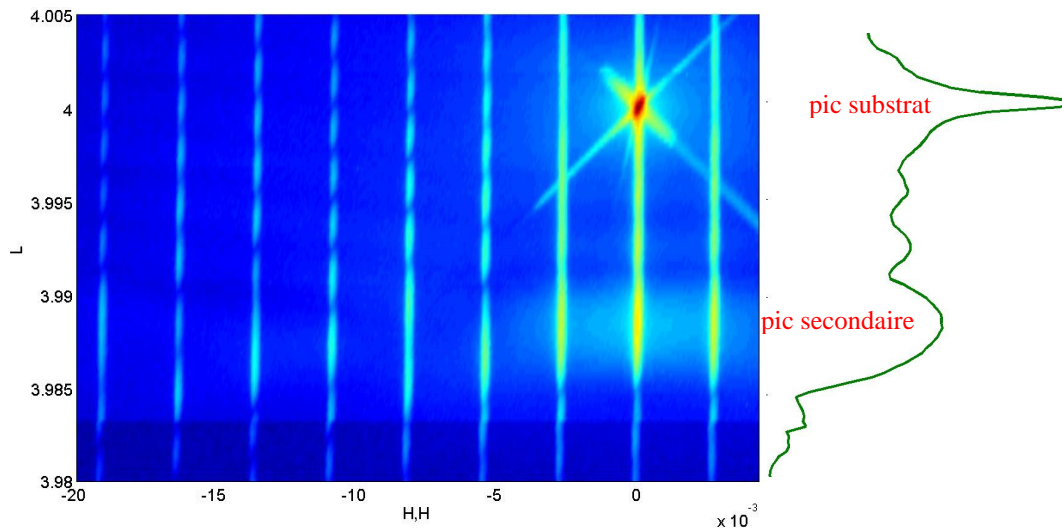


Figure III- 34: Cartographie symétrique 004 pour échantillon 200 nm (gauche) et balayage suivant la direction L extrait de la cartographie en H,H=0.

ϵ_{zz} s'obtient donc par lecture directe de la position du pic secondaire sur le balayage suivant L extrait du satellite contenant le pic de diffraction du substrat. Pour ϵ_{xx} , on interpole l'enveloppe du signal diffracté avec des balayages suivant H pour trouver la position du pic secondaire. Ces balayages sont extraits des cartographies asymétriques pour des valeurs de L correspond à la déformation ϵ_{zz} mesurée sur les cartographies 004.

Des mesures ont également été faites dans le plan (y,z) le long des lignes. La Figure III- 35 présente une cartographie asymétrique 224 sur un échantillon de période 580 nm, prise dans le plan (y,z). Sur une telle cartographie, les déplacements du signal diffracté dans la direction L représentent les déformations suivant z et les déplacements du signal dans la direction H,H représentent les déformations suivant y (le long des lignes de silicium dans ce cas). Sur cette cartographie, on voit également un pic secondaire mentionné précédemment. Cependant, dans ce cas, le décalage par rapport au pic du substrat non déformé est uniquement dans la direction L, même s'il s'agit d'une raie asymétrique. Ceci montre qu'il n'y pas de déformation dans la direction y. Nous avons donc pu mesurer expérimentalement une déformation nulle le long des lignes. Cela s'explique par la longueur des lignes (2mm), très grande comparée à leur largeur. Nous sommes donc bien dans des conditions de déformations planes. Ce qui confirme l'hypothèse prise pour la modélisation par éléments finis.

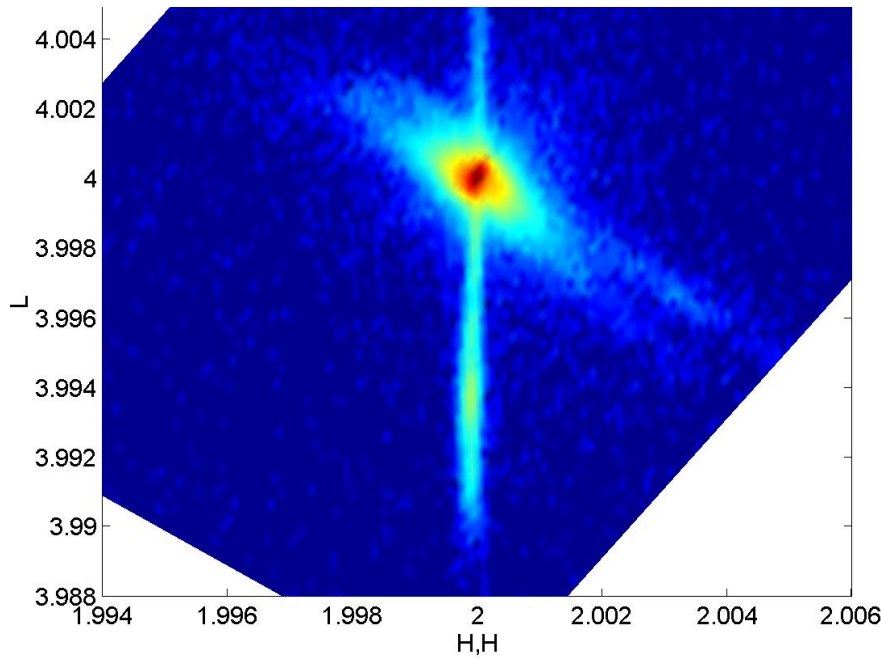


Figure III- 35: Cartographie asymétrique 224 pour un échantillon de période 580 nm prise dans le plan (y,z).

La simulation par éléments finis (FEM) est maintenant nécessaire pour obtenir des informations plus locales et pour confirmer l'hypothèse du pic secondaire.

4.2 Etude des profils de déformations

Dans le cadre des simulations par éléments finis, la contrainte est modélisée en assignant des coefficients de dilatation thermique aux différents matériaux puis en appliquant un gradient de température au système. Le système évolue ensuite sous l'action d'une variation thermique vers son état d'équilibre. Les calculs sont réalisés sur une période unique avec pour conditions limites un déplacement nul suivant x sur les bords latéraux. A partir du calcul de l'ensemble du champ de déplacement nous avons extrait une coupe verticale montrant la variation de la déformation avec la profondeur dans le Si de la zone active (Figure III- 36). Cette étude a été réalisée pour des échantillons de $2\mu\text{m}$ et de 580 nm de période, afin de comparer leur comportement.

Quel que soit l'échantillon, la déformation est négative suivant x et positive suivant z. Pour la plus grande période, la déformation est maximale à la surface et décroît progressivement avec la profondeur pour s'annuler vers 600nm . A une profondeur correspondant à la taille des tranchées (410 nm), la déformation dans le silicium est déjà très faible ($<5 \cdot 10^{-5}$). Pour l'échantillon de période 580 nm , le profil de déformation est différent. La déformation suivant x reste constante sur une profondeur de presque 200 nm au milieu de la ligne de silicium à une valeur de $\varepsilon_{xx} \approx -1,65 \cdot 10^{-3}$. Suivant la direction z, la déformation varie très peu également sur la même profondeur à une valeur de $\varepsilon_{zz} \approx 1,6 \cdot 10^{-3}$.

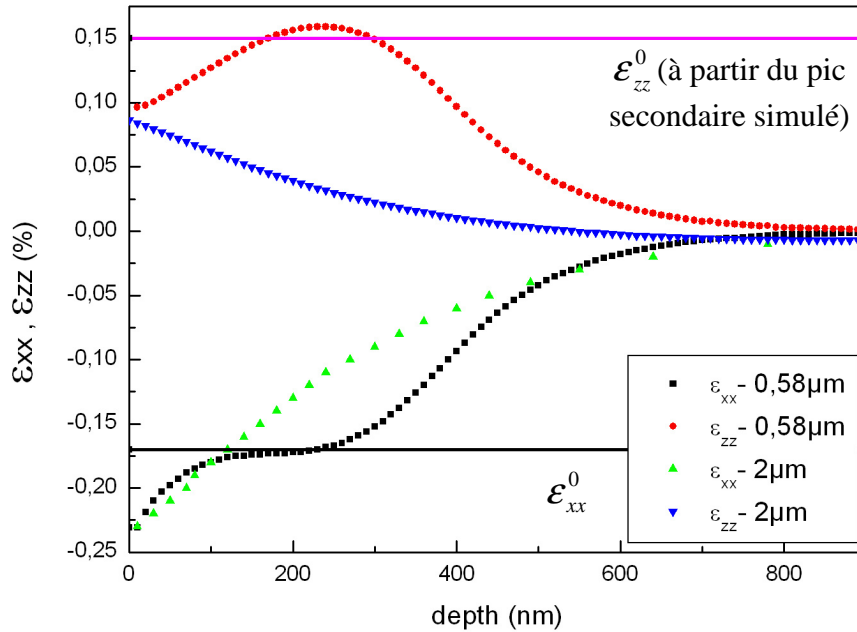


Figure III- 36: Profils de déformations au centre de la ligne de silicium pour une période de 2 μm et 580 nm. Les traits roses et noirs représentent respectivement les déformations suivant z et x déduites de la position du pic secondaire sur la cartographie simulée (Figure III- 37).

Les déformations ainsi calculées à l'aide de FEMLAB et dont les profils en Figure III- 36 sont extraits, ont été utilisées pour calculer une cartographie 404 (Figure III- 37). Sur cette cartographie, on voit aussi apparaître un pic secondaire, il y a donc effectivement une zone assez grande où la déformation du silicium est constante pour former un second pic de diffraction. De plus, les déformations obtenues à partir de la position du pic secondaire sur la cartographie simulée (reportées par un trait rose pour la déformation dans la direction z et un trait noir pour la déformation dans la direction x sur la Figure III- 36) correspondent aux valeurs de déformations constantes sur les profils, au centre des lignes de silicium. Cette partie de la ligne diffracte donc comme s'il s'agissait d'un autre cristal avec un paramètre de maille légèrement différent de celui du silicium. Ce qui permet d'expliquer la présence d'un pic secondaire sur les cartographies expérimentales et simulées des échantillons de période 580 nm.

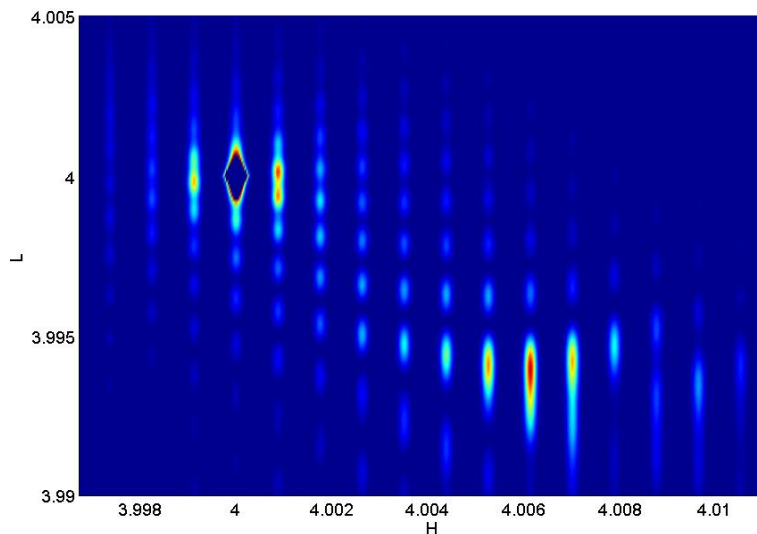


Figure III- 37: Cartographie asymétrique 404 pour un échantillon de période 580 nm, simulée à partir des déformations calculées avec FEMLAB.

Les profils de déformations pour l'échantillon de période 200 nm sont du même type que ceux de l'échantillon de période 580 nm mais avec des valeurs de déformations plus élevées. Il y a apparition d'un pic secondaire dans l'espace réciproque sur les cartographies simulées avec un très bon accord entre les déformations déduites de la position de ce pic et les valeurs de déformations stables au centre de la ligne.

4.3 Répétabilité des mesures

L'apparition d'un pic secondaire sur les cartographies de l'espace réciproque pour les échantillons de périodes sub-microniques, permet donc d'accéder à une mesure directe des valeurs de déformation dans les lignes de Si. Nous avons utilisé cette mesure directe afin de vérifier la répétabilité des mesures. Le même échantillon a donc été mesuré plusieurs fois en utilisant différentes raies de diffraction et différentes préparations dans certains cas (scotch double-face au lieu de la cire).

Cinq mesures ont été faites sur le même échantillon de période 580 nm avec une largeur de lignes de 240 nm. Les valeurs des déformations dans la direction z obtenues avec la position du pic secondaire sont $\epsilon_{zz}^0 = 1,66 \cdot 10^{-3}$, $1,64 \cdot 10^{-3}$, $1,58 \cdot 10^{-3}$, $1,57 \cdot 10^{-3}$ et $1,56 \cdot 10^{-3}$. La valeur moyenne des cinq mesures est $1,61 \cdot 10^{-3}$.

En comparant la valeur moyenne à l'ensemble des valeurs obtenues expérimentalement, on peut estimer la répétabilité de la mesure à $\pm 5 \cdot 10^{-5}$ pour la mesure directe des déformations au centre des lignes de silicium.

5. Cartographies simulées et comparaison aux mesures HR-XRD

5.1. Choix de la profondeur de silicium à prendre en compte

Il est difficile de connaître avec précision le volume diffractant. De plus celui-ci dépend également des plans de diffraction mesurés. Nous allons définir dans ce paragraphe la profondeur de substrat (à partir du fond des tranchées) à prendre en compte pour les calculs d'intensité. Prendre une quantité trop importante de substrat va rallonger le calcul, inversement il ne faut pas éliminer une partie du silicium dont les déplacements influencent l'intensité diffractée.

Nous avons donc comparé les satellites d'ordre +1 (l'ordre 0 étant le satellite contenant le pic de substrat) pour différentes quantités de substrat pris en compte dans le calcul. L'étude porte sur le satellite +1 car c'est sur celui-ci que l'effet du substrat est le plus visible. La structure utilisée a les caractéristiques suivantes : $p = 580$ nm, $b = 240$ nm et $h = 410$ nm. Le chargement thermique est de 1000°C .

La Figure III- 38 montre l'intensité du satellite d'ordre 1 (suivant la direction L) calculée avec différentes profondeurs de substrat pour une cartographie 404.

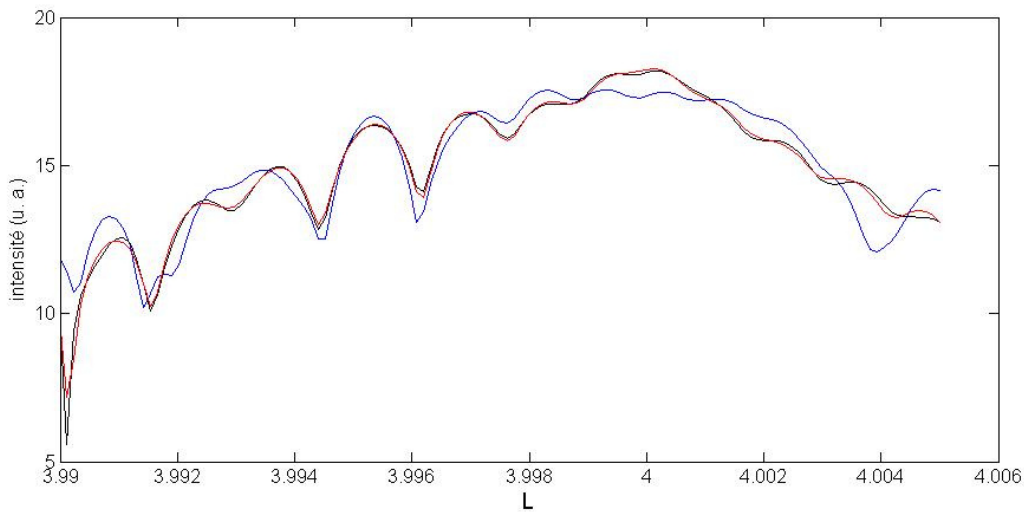


Figure III- 38: Comparaison de l'intensité du satellite d'ordre 1 calculée pour différentes profondeurs de substrat. Les courbes bleues, noires, vertes et rouges représentent respectivement l'intensité calculée pour une profondeur de substrat de 200 nm, 400 nm, 500 nm et 4,1 µm. Ces deux dernières étant superposées, seule la courbe rouge est visible.

La courbe verte (500 nm) n'est pas visible sur le graphique car elle est superposée à la courbe rouge. Cela signifie que pour une profondeur de substrat supérieure 500 nm, l'intensité ne varie pas. En deçà de 500nm, de légères différences commencent à être visibles mais restent très faibles pour 400 nm de substrat (noire). Lorsque l'on considère seulement 200 nm de silicium sous les tranchées (bleue), les différences dans l'intensité du satellite deviennent beaucoup plus visibles et ne sont plus du tout acceptables. La même étude portant sur des cartographies 004 aboutit aux mêmes conclusions. En tenant compte d'au moins 500 nm de substrat, on s'affranchit donc de tout effet du substrat sur l'intensité des satellites.

5.2. Critère de comparaison des cartographies

Afin d'obtenir le meilleur accord possible entre les cartographies calculées par FFT et les mesures expérimentales, la comparaison des cartographies a été automatisée en utilisant une fonction d'erreur: χ^2 . Cet outil mathématique consiste à sommer le carré de la différence entre chaque point de la cartographie calculée et mesurée. (voir Equation 25)

$$\chi^2 = \sum_{(i,j)} \frac{(I_{\text{exp}} - I_{\text{simul}})^2}{I_{\text{ext}}} \quad (25)$$

Avec (i,j) les coordonnées des points de la cartographie de l'espace réciproque

Pour cette comparaison, les cartographies mesurées et calculées sont réduites sous la forme d'une matrice où chaque colonne correspond à l'intensité d'un satellite. Cette transformation est nécessaire pour 2 raisons: Le nombre de points par cartographie est très important (jusqu'à 50000 points) et un grand nombre de points expérimentaux ne sont pas utiles dans cette

comparaison, seule l'intensité des satellites nous intéresse. En effet, expérimentalement, les points se situant entre les satellites doivent être d'intensité nulle et ne contiennent que du bruit. Dans le cas des mesures expérimentales, l'intensité est intégrée sur la largeur d'un satellite. Le programme permettant cette transformation en matrice est donnée en annexe 3.

Dans le cadre de l'approximation cinématique, l'intensité du substrat devrait être traitée dynamiquement. Le calcul de l'intensité du satellite contenant le pic de diffraction du substrat est faux et la valeur calculée pour le pic du substrat est beaucoup plus grande que la valeur réelle. Afin que cette approximation n'empêche pas la comparaison de cartographies entières, nous n'avons pas tenu compte de l'intensité de ce pic. L'intensité du substrat n'étant pas ajustée, elle ne peut donc pas servir de référence. Afin de permettre la comparaison des intensités avec la fonction χ^2 , toutes les intensités des cartographies ont donc été normalisées par rapport à l'intensité du pic secondaire.

5.3. Résultats

5.3.1. Ajustement à un paramètre

Cette méthode consiste à calculer des cartographies pour toute une gamme de chargement thermique ΔT . Comme le champ de déplacement varie linéairement avec la température, les calculs éléments finis des déplacements sont faits pour une variation de température assez faible (20°C par exemple). Ce champ de déplacement est multiplié pour obtenir la cartographie à la température voulue. Chaque cartographie calculée est ensuite comparée avec la mesure expérimentale.

La géométrie utilisée est donnée en Figure III- 39. Le code MatLab pour ces calculs est détaillé en annexe 3. Pour un échantillon de période 580 nm (avec $b = 240$ nm et $h = 410$ nm), le χ^2 minimum est obtenu pour un ΔT de 1500 °C.

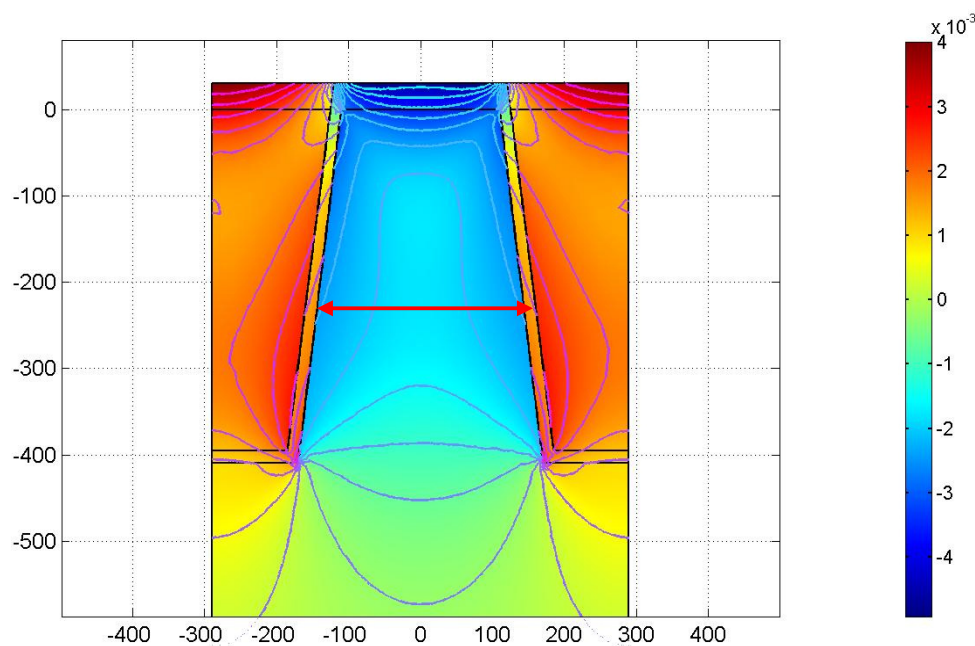


Figure III- 39: Champ de déformation suivant z (ϵ_{zz}) calculé avec FEMLAB sur une période de 580 nm. Les lignes d'iso-déformations sont séparées de $\pm 0.45 \cdot 10^{-3}$. La flèche représente la position de la coupe donnée en Figure III- 44.

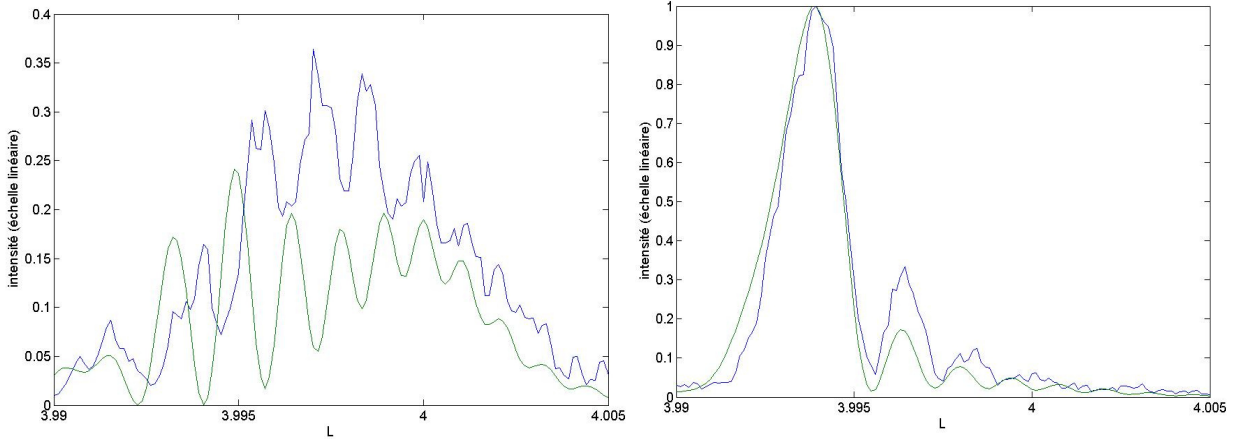


Figure III- 40: Comparaison de l'intensité mesurée (en bleu) et simulée (en vert) pour les satellites d'ordre +3 et +7 (notés respectivement (c) et (a) sur la Figure III- 41).

On remarque que l'accord entre cartographie expérimentale et simulée n'est que partiel. La simulation est en accord avec les mesures lorsqu'on se place sur le satellite qui contient le pic secondaire (Figure III- 40 à droite). Mais lorsque l'on compare l'intensité simulée et mesurée pour des valeurs de H plus grandes (satellites d'ordre plus élevés) ou plus faibles (satellites plus proches du substrat), l'accord devient moins bon comme pour le satellite d'ordre + 3 (par rapport au substrat) sur la Figure III- 40 à gauche. C'est pourquoi nous avons rajouté un deuxième paramètre d'ajustement pour essayer d'avoir un meilleur accord entre les cartographies simulées et mesurées.

5.3.2. Ajustement à deux paramètres

Afin d'ajuster au mieux la cartographie calculée, un deuxième paramètre a été introduit dans le calcul (voir annexe 3). Ce paramètre a consisté à tenir compte de l'oxyde thermique fin ('liner') et de lui appliquer un chargement différent de l'oxyde de remplissage des tranchées. Ce paramètre a été choisi car les oxydes thermiques ont des caractéristiques physiques différentes et dans le cas des échantillons étudiés, ils sont également formés à d'autres températures et conditions que l'oxyde déposé ensuite. Le χ^2 est alors calculé en fonction de ΔT_{liner} et ΔT_{STI} et peut se représenter sous forme d'une cartographie pour trouver la meilleure combinaison et observer son évolution générale en fonction de chaque paramètre. Avec cette nouvelle approche, le χ^2 minimum obtenu est plus faible. Les Figures III-41a et III-41b montrent les cartographies expérimentales et simulées pour un échantillon de période 580 nm. On remarque un bon accord global entre les deux cartographies. La position du pic secondaire observé précédemment est la même sur les deux cartographies et correspond bien aux valeurs de déformations homogènes obtenues par éléments finis au centre de la ligne de silicium.

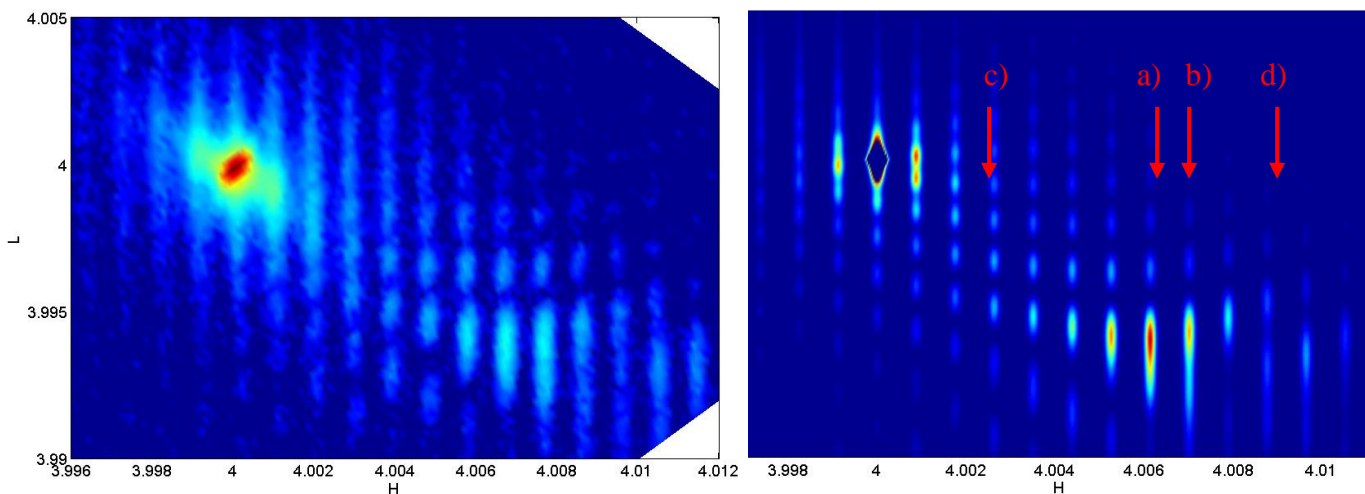
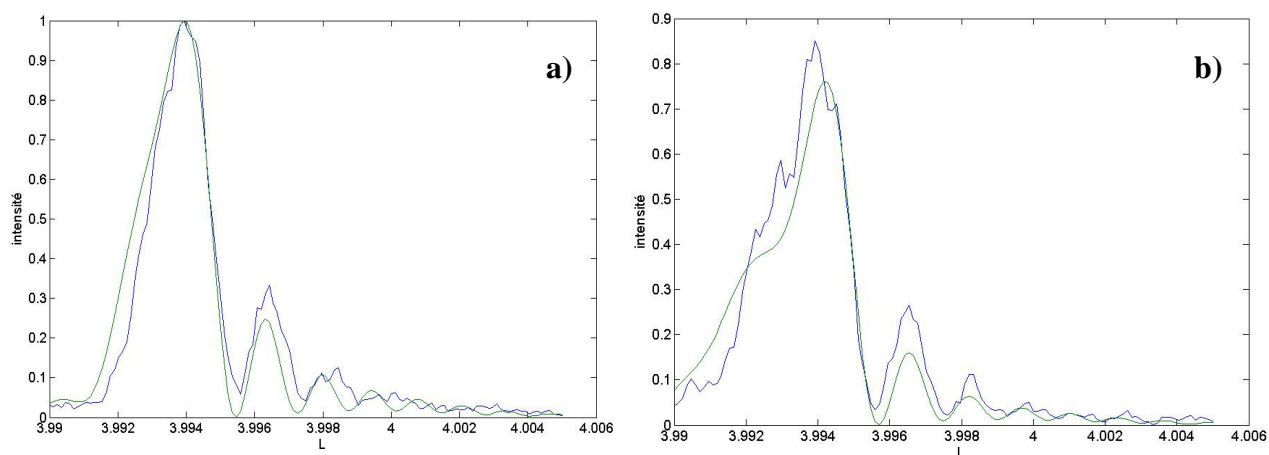


Figure III- 41: Cartographie asymétrique 404 mesurée (a) et simulée (b) pour un échantillon de période 580 nm. $b = 240$ nm, $h = 410$ nm.

Cependant l'accord entre les deux cartographies n'est pas complet. En effet si l'on compare l'intensité des satellites proches du pic secondaire (satellite d'ordre +7 et +8, noté a) et b) sur la Figure III- 41b), on se rend compte qu'il y a un bon accord entre les mesures expérimentales et les cartographies calculées (Figure III- 42a et Figure III- 42b). Lorsque l'on s'éloigne de ces satellites et donc du pic secondaire, l'accord entre simulation et expérience devient moins bon (Figure III- 42c et Figure III- 42d).



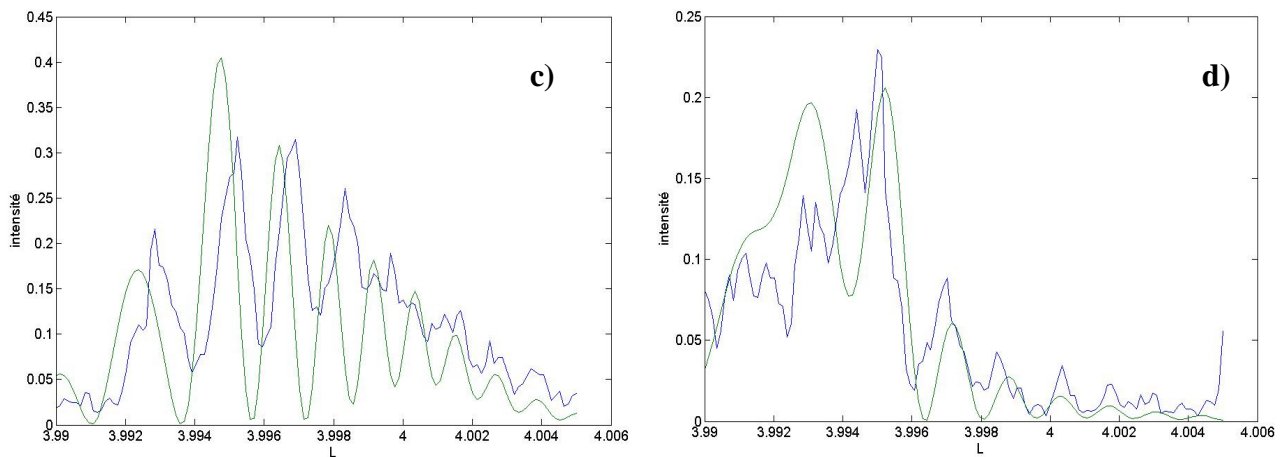


Figure III- 42: Comparaison de l'intensité mesurée (en bleu) et simulée (en vert) pour les satellites d'ordre +7 (a) , +8 (b), +3(c) et +10 (d).

Que l'ajustement soit à un ou deux paramètres, la position du pic secondaire est bien simulée. En comparant les simulations à un et deux paramètres (Figure III- 43), on se rend compte que les différences sont principalement au niveau des satellites les plus éloignés du pic secondaire (graphe de gauche). Pour le satellite d'ordre +7, contenant l'intensité maximale, les deux simulations sont quasi-identiques (graph. de droite).

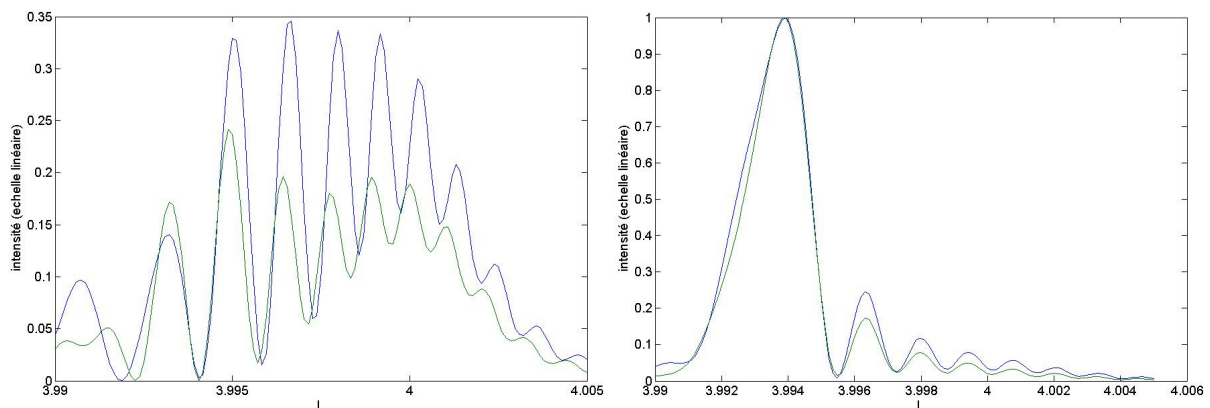


Figure III- 43: Comparaison de l'intensité simulée avec un seul paramètre (en vert) ou deux paramètres (en bleu) pour les satellites d'ordre +3 et +7.

Nous avons comparé les deux champs de déformations simulées pour savoir quelle partie de ligne de silicium était responsable des différences que l'on voit sur la Figure III- 43. La Figure III- 44 montre une coupe des déformations dans le silicium suivant la largeur de la ligne à une profondeur de 200 nm. La position de cette coupe dans la ligne est également visible sur la Figure III- 39. Cette figure met en évidence plusieurs points importants. Les valeurs de déformations au centre de la ligne sont les mêmes, ce qui explique pourquoi il y a un bon accord sur la position du pic secondaire pour les 2 simulations. Les différences entre les deux simulations sont principalement situées près des bords de la ligne. Ces différences aux bords entraînent des différences non négligeables sur l'intensité des satellites (en dehors du pic secondaire). On peut en déduire que les satellites qui sont éloignés du pic secondaire dans

l'espace réciproque sont très sensibles au champ de déformations près des bords de la ligne. Cette sensibilité aux déformations rend très difficile l'ajustement précis des cartographies simulées avec les cartographies mesurées.

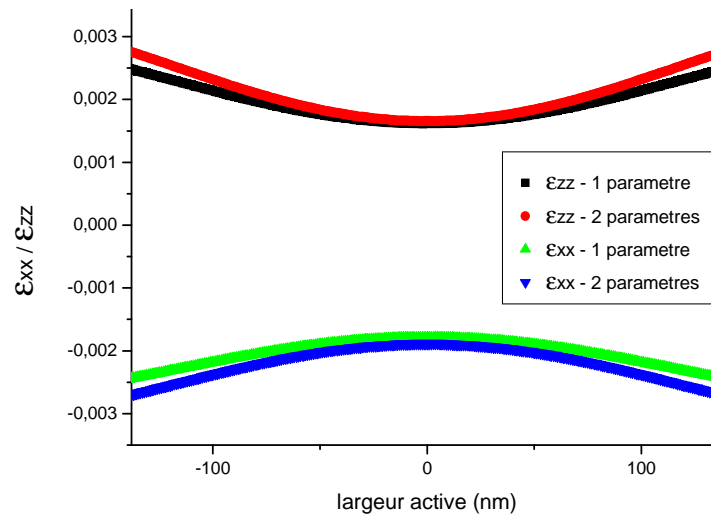


Figure III- 44: Coupe donnant les déformations ϵ_{xx} et ϵ_{zz} dans le silicium suivant la direction x (largeur de l'active) à une profondeur de 200 nm. La position de cette coupe est donnée en Figure III- 39.

L'ajustement à deux paramètres a été également mené sur des échantillons de période 200 nm. Les mesures expérimentales ont dans ce cas été faites à l'ESRF sur BM 32. La Figure III- 45 montre la cartographie expérimentale pour cet échantillon avec les satellites d'ordre -3 et -6 notés respectivement a) et b) pour les comparaisons d'intensité de la Figure III- 46.

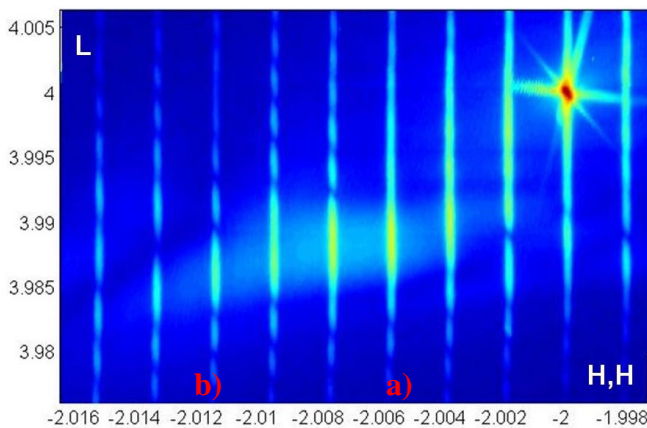


Figure III- 45: Cartographie asymétrique -2-24 mesurée à l'ESRF pour un échantillon de période 200 nm. Les satellites d'ordre -3 et -6 ont été respectivement annotés a) et b). $b = 90$ nm, $h = 250$ nm.

En observant les comparaisons d'intensités expérimentales et simulées (Figure III- 46), on aboutit aux mêmes observations que pour l'échantillon de période 580 nm. L'accord est correct sur les satellites proches du pic secondaire (Figure III- 46a). Cet accord se dégrade lorsque l'on s'éloigne de cette partie de la cartographie (Figure III- 46b). Sur l'ensemble de la cartographie l'accord est cependant moins bon que pour les échantillons de période 580 nm. Les zones dans la ligne de silicium proches des interfaces n'étant pas simulées correctement, une explication serait que ces zones prennent une part plus importante dans le calcul lorsque

les lignes sont plus petites. La proportion de la ligne où les déformations ne sont pas convenablement calculées est donc plus grande, rendant plus difficile l'obtention d'un bon accord sur l'ensemble de la cartographie.

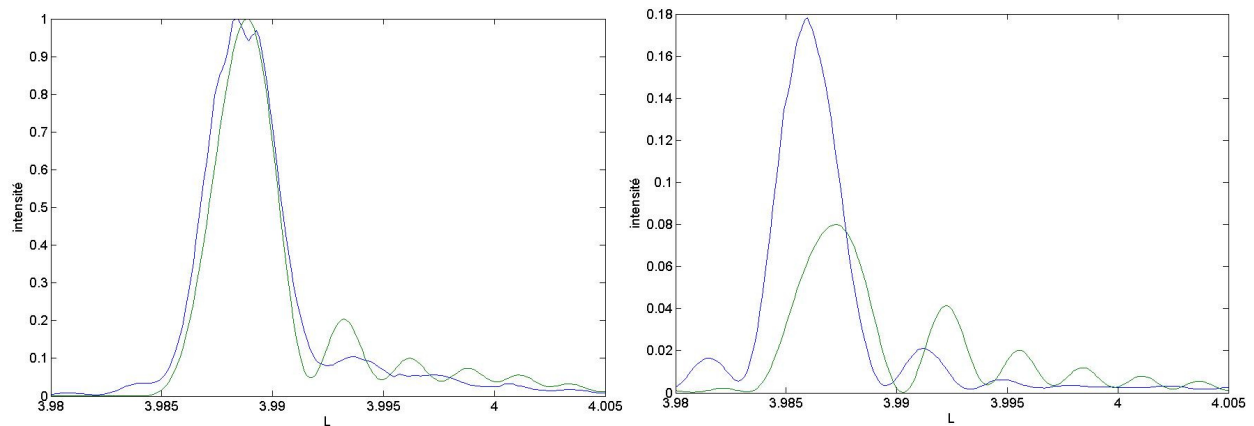


Figure III- 46: comparaison de l'intensité mesurée (en bleu) et simulée (en vert) pour les satellites d'ordre -3 (a) et -6 (b).

On pourrait essayer d'ajouter d'autres paramètres pour se rapprocher un peu plus de la cartographie mesurée mais la méthode devient vite très longue car elle calcule toutes les combinaisons de paramètres. Une autre approche pourrait consister à prendre plusieurs paramètres et à utiliser un algorithme de 'recuit simulé' ou génétique pour obtenir la meilleure combinaison. Cette dernière méthode consiste à générer une solution avec une combinaison aléatoire de paramètres et à les faire 'évoluer' vers la solution la plus proche possible du résultat voulu.

5.3.3 Conclusion

Ces observations nous ont permis de déduire plusieurs points importants :

- ◆ La position du second pic de diffraction visible sur les cartographies pour les structures de période inférieure à 1 μm est bien en accord avec les valeurs de déformations homogènes dans la ligne de silicium. On a donc la possibilité de faire des mesures directes de déformations sur ces échantillons sans avoir à utiliser de modèle. Nous disposons donc d'une méthode simple de détermination des déformations au centre des zones actives. Cette méthode sera appliquée de manière systématique pour mettre en évidence l'influence des variations de procédé sur les contraintes induites dans le chapitre suivant.
- ◆ Le bon accord entre l'intensité mesurée et simulée sur les satellites proches du pic secondaire a permis de valider le modèle mécanique sur la zone homogène en déformations sur des lignes de moins de 100 nm dans le cas des échantillons de période 200 nm
- ◆ L'étude du profil des déformations pour les deux types d'ajustement a montré une grande sensibilité aux déformations près des bords de la ligne. Le désaccord sur les satellites plus éloignés du pic secondaire signifie donc que les déformations calculées ont besoin d'être modifiées près des interfaces. Ces différences sont attribuées au modèle mécanique utilisé. Sa facilité d'utilisation est en effet un avantage mais dans

ce cas, la complexité des échantillons nous empêche de valider l'ensemble du champ de déformation simulé. Certaines étapes du procédé comme la diffusion ou les oxydations thermiques ne peuvent être simulées avec précision par le logiciel FEMLAB. Cela montre à nouveau à quel point la diffraction X est sensible aux déformations locales.

Conclusion

Ce chapitre décrit l'utilisation de la diffraction de rayons X haute-résolution pour mesurer les déformations locales induites dans le silicium par des tranchées d'isolation STI remplies d'oxyde. Dans un premier temps, nous avons présenté les principes de base de la diffraction de rayons X, l'amplitude diffusée dans le cadre de l'approximation cinématique pour des cas idéaux et plus particulièrement dans le cas d'échantillons périodiques.

Nous avons ensuite détaillé le fonctionnement des mesures expérimentales en laboratoire et à l'ESRF. Puis nous avons exposé la méthodologie de la simulation des cartographies de l'espace réciproque avant d'expliquer le calcul proprement dit.

L'étude de l'influence de la période des échantillons (de 2 μm à 200 nm) sur les cartographies du réseau réciproque montre l'apparition d'un pic secondaire pour les échantillons de période inférieure au μm . Les profils de déformations simulés par éléments finis nous montrent que ce pic secondaire provient de la diffraction du centre de la ligne, qui est déformé de manière homogène. Cette partie de la ligne diffracte donc comme s'il s'agissait d'un autre cristal avec un paramètre de maille légèrement différent de celui du silicium. Cette particularité des échantillons submicroniques nous permet donc de mesurer directement et sans modèle les déformations dans ces échantillons. Cette technique sera employée dans le chapitre suivant pour étudier l'influence de paramètres géométriques et de variations de procédé sur les contraintes induites dans le silicium. Une analyse de répétabilité a également permis de montrer que cette mesure de déformations était reproductible avec une précision de $\pm 5 \cdot 10^{-5}$.

Pour finir, nous avons détaillé comment les cartographies simulées sont ajustées sur les mesures expérimentales par un programme de comparaison automatique par l'intermédiaire d'une fonction d'erreur de type χ^2 . Le bon accord entre l'intensité mesurée et simulée sur les satellites proches du pic secondaire a permis de valider le modèle mécanique sur la zone homogène en déformation sur des lignes de moins de 100 nm de large dans le cas des échantillons de période 200 nm. En revanche, le désaccord sur les satellites plus éloignés du pic secondaire signifie que les déformations calculées ont besoin d'être modifiées près des interfaces. Ces différences sont attribuées au modèle mécanique utilisé. Sa facilité d'utilisation est en effet un avantage mais dans ce cas, la complexité des échantillons nous empêche de valider l'ensemble du champ de déformation simulé. Certaines étapes du procédé comme la diffusion ou les oxydations thermiques ne peuvent être simulées avec précision par le logiciel FEMLAB. Ce désaccord simulation/mesure montre à nouveau à quel point la diffraction X haute résolution est sensible aux détails du champ de déformation, notamment aux bords des lignes d'actives. L'utilisation d'un modèle mécanique plus complet (par exemple en utilisant un logiciel simulant l'ensemble des étapes du procédé tel que ISE) devrait permettre d'obtenir un meilleur accord.

References :

- [Aza74] L.V. Azaroff, R. Kaplow, N. Kato, R.J. Weiss, A.J.C. Wilson, R.A. Young, 'X-Ray Diffraction' (McGraw-Hill, New York, 1974)
- [Cow75] J.M. Cowley, 'Diffraction Physic' (North Holland, Amsterdam 1975)
- [Dai99] J. Daillant, A. Gibaud, 'X-Ray and Neutron Reflectivity : Principles and Applications', Springer, 1999
- [DuM37] J.W.M. Dumond, Phys. Rev. 52, 872(1937)
- [ESR1] <http://www.esrf.eu/Decouvrir/Visitevirtuelle>
- [ESR2] <http://www.esrf.eu/Decouvrir/Visitevirtuelle/anneau>
- [Few03] P.F. Fewster, 'X-Ray Diffraction from Semiconductors', Imperial College Press, 2003
- [Few89] P.F. Fewster, J. Appl. Cryst. 22 (64) (1989)
- [Gai07] M. Gailhanou, A. Loubens, J.-S. Micha, B. Charlet, A.A. Minkevich, R. Fortunier, and O. Thomas, Appl. Phys. Lett. 90, 111914 (2007).
- [Gui56] A. Guinier, 'Théorie et Technique de la Raiocristallographie' (Dunod, Paris, 1956)
- [Gui94] A. Guinier, 'X-Ray Diffraction In Crystals, Imperfect Crystals and Amorphous Bodies', Dover, 1994
- [Hol99] V. Holy, U. Pietsch, T. Baumbach : 'High-Resolution X-Ray Scattering from Thin films and Multilayers', Springer, 1999
- [Jam62] R. W. James, 'The Optical Principles of the Diffraction of X-Rays', 1962
- [Kag02] V. M. Kaganer, B. Jenichen, G. Paris, K.H. Ploog, O. Konovalov, P. Mikulik and S. Arai, Phys. Rev. B 66 (2002)
- [Lau37] M. von Laue, 'Röntgenstrahlinterferenzen' (Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G., Leipzig, 1937)
- [Lou06] A. Loubens, 'Champ de déformation induit dans un monocristal par un réseau de dimension submicroniques : diffraction des rayons X en mode haute résolution et simulation par éléments finis', Thèse de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne et de l'Université Jean Monnet de Saint-Etienne (2006).
- [Pie06] U. Pietsch, 'X-ray high-resolution scattering instrumentation', tutorial XTOP2006 (2006)
- [Pin78] Z. G. Pinsker, 'Dynamical Scattering of X-rays in Crystals', 1978
- [Sch87] L.H. Schwartz, J.B. Cohen, 'Diffraction from materials', Mat. Res. Eng., Springer, 1987.
- [She97] Q. Shen and S. Kycia, Phys. Rev. B 55 (23), 15791 (1997).
- [Ste94] S.A. Stepanov, R. Köhler, J. Phys. D : Appl. Phys. 27, 1922 (1994)
- [Ste98] S.A. Stepanov, E.A. Kondrashkina, R. Köhler, D.V. Novikov, G. Materlik, S.M. Durbin, Phys. Rev. B 57, 4829 (1998)

[Uly95] A.P. Ulyanekov, S.A. Stepanov, U. Pietsch, R. Köhler, J. Phys. D: Appl. Phys. 28, 2522 (1995)

[War90] B. E. Warren, 'X-Ray Diffraction', 1990

[Zau82] P. Zaumseil and U. Winter, Phys. Status Solidi A 70 (497) (1982)

CHAPITRE IV

**Etude par Diffraction X Haute-Résolution
de l'influence des paramètres de
fabrication sur les déformations et les
contraintes générées par le procédé STI**

Dans le chapitre précédent, il a été montré que dans le cas des structures périodiques étudiées, l'apparition d'un pic secondaire sur les cartographies de l'espace réciproque réalisées par diffraction de rayons X haute résolution, permettait d'accéder à une mesure directe des valeurs de déformation moyenne dans les lignes de Si avec une sensibilité sur les déformations de $\sim 5 \cdot 10^{-5}$.

Dans ce chapitre, nous allons utiliser cette méthode de mesure directe de déformations pour étudier l'influence des paramètres de fabrication du STI sur les contraintes. Tout d'abord nous allons étudier les deux procédés de fabrication des tranchées STI : le procédé STI dit standard (STI Std) et le Self Aligned STI (SA-STI). Le but de cette étude est de savoir quelle technologie introduit le moins de contraintes dans le silicium. Ces deux procédés sont décrits en détail dans le chapitre I. Nous allons également étudier l'apparition des contraintes au cours du procédé SA-STI en mesurant les déformations lors des étapes clés de fabrication. Nous allons ensuite détailler l'effet de variations de géométrie et de procédé avant de finir le chapitre avec des mesures de diffraction sur des structures plus complexes et équivalentes à des produits réels.

1. Etude de deux procédés STI : comparaison SA-STI / STI Std

La principale différence entre les deux procédés STI réalisés à ATMEL Rousset réside dans l'ordre dans lequel sont effectuées les diverses étapes de fabrication. La Figure IV- 1 résume les principales étapes du procédé STI-Std (gauche) et SA-STI (droite) ainsi que les étapes étudiées dans le paragraphe 2. En STI-Std, on commence par graver le silicium et remplir les tranchées avant de fabriquer l'oxyde de grille et déposer les différentes couches sur la ligne de silicium (appelée active). En SA-STI, l'oxyde de grille, l'implantation des dopants et le dépôt des couches sont réalisés avant l'étape de gravure. Certains bilans thermiques sont donc effectués sur des couches pleines plaques dans le cas du procédé SA-STI alors que le réseau de lignes est déjà fabriqué dans le cas du procédé STI-Std. Nous allons voir si ces différences de procédé introduisent également une différence au niveau des déformations. Toutes les mesures de diffraction de ce paragraphe ont été réalisées avec le monochromateur Dumond-Bartels.

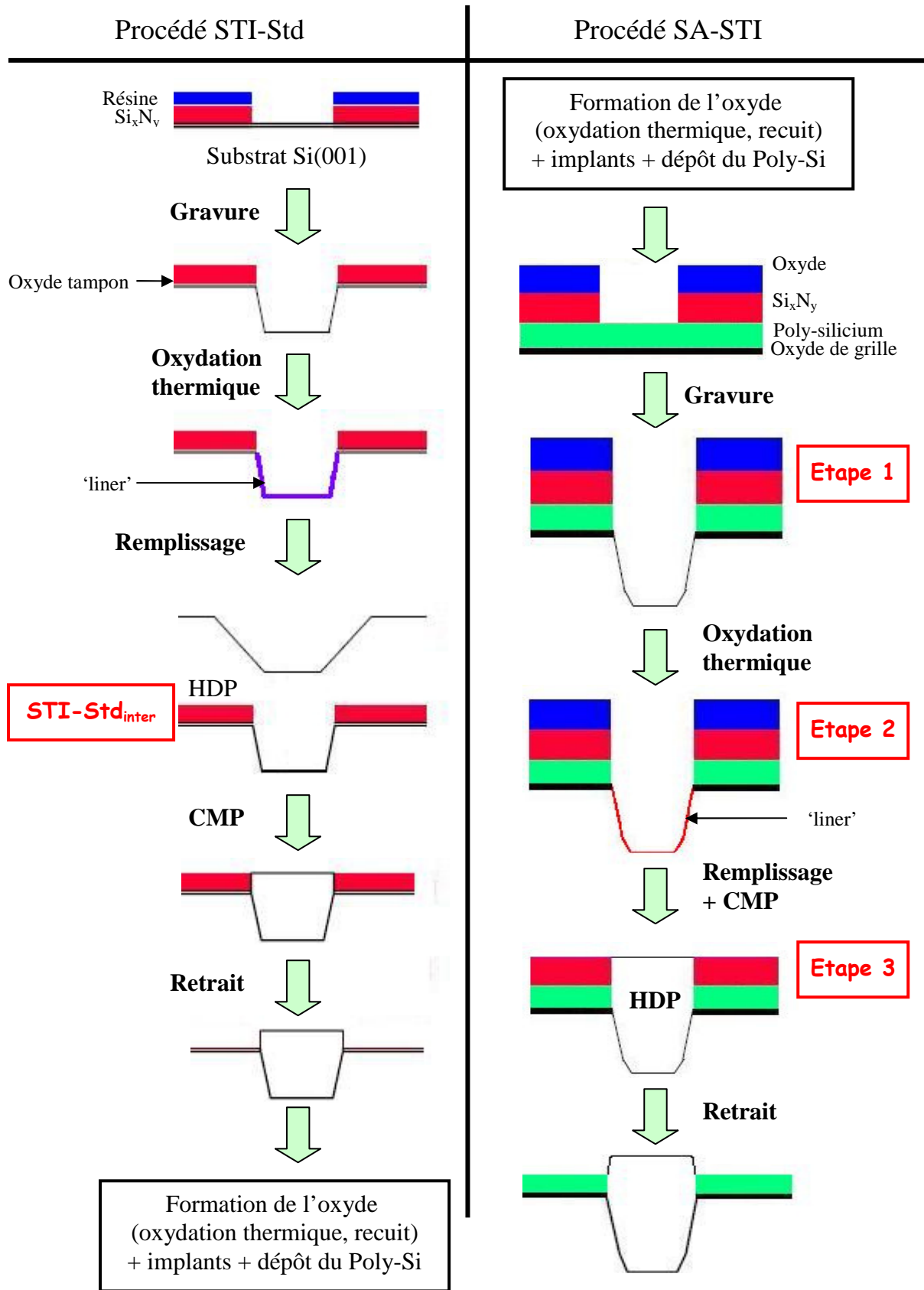


Figure IV- 1: Rappel des principales étapes du procédé STI-Std (gauche) et SA-STI (droite) ainsi que les étapes étudiées pour le SA-STI dans le paragraphe 2.

La Figure IV- 2 montre les cartographies 004 de l'espace réciproque pour 2 échantillons prélevés à la fin du procédé STI-Std (a) et SA-STI (b). Sur ces échantillons, le poly-silicium a été retiré. La Figure IV- 3 montre les cartographies asymétriques 404 des mêmes échantillons.

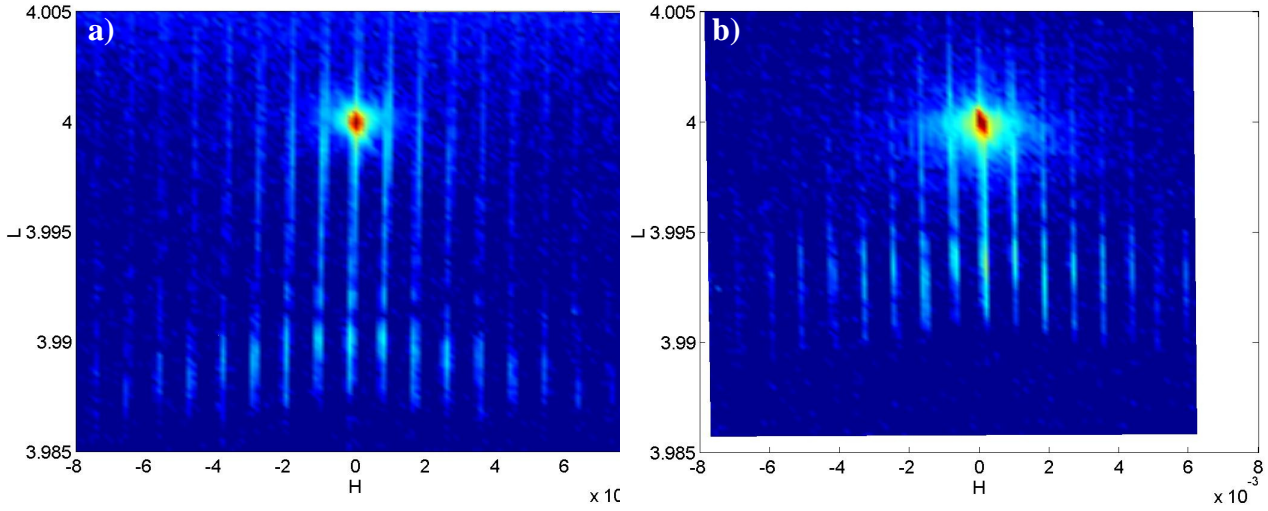


Figure IV- 2: Cartographies de l'espace réciproque de la raie 004 du silicium, pour le même échantillon (p= 580 nm, b= 240 nm et h= 410 nm) fabriqué avec le procédé STI-Std (a) et avec le procédé SA-STI (b).

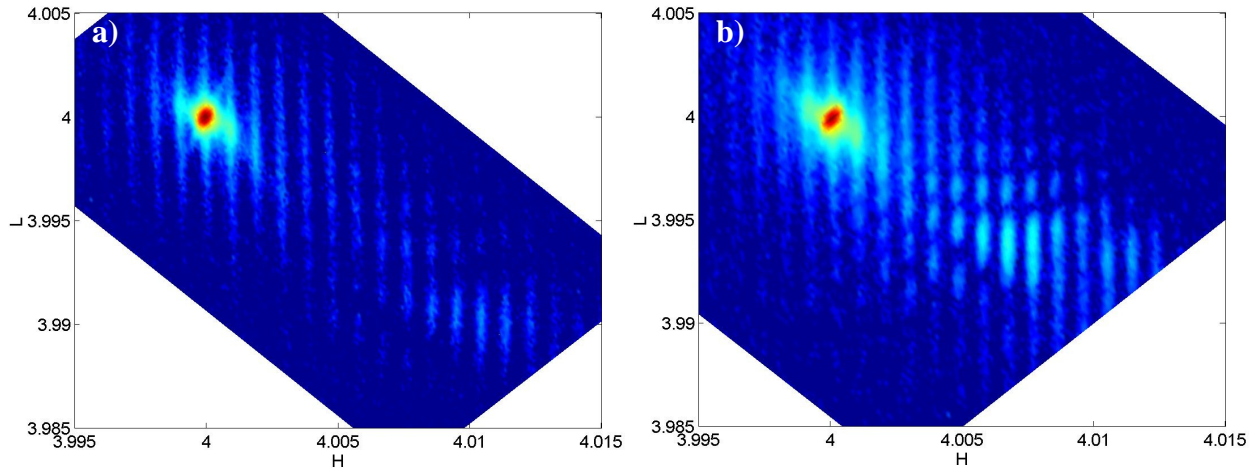


Figure IV- 3: Cartographies de l'espace réciproque de la raie 404 du silicium, pour le même échantillon (p= 580 nm, b= 240 nm et h= 410 nm) fabriqué avec le procédé STI-Std (a) et avec le procédé SA-STI (b).

Sur toutes les cartographies des Figures IV-2 et IV-3, on observe un pic secondaire. La valeur des déformations peut être déduite de sa position dans l'espace réciproque (Equation (1))

$$\varepsilon_{xx}^0 = \frac{-\Delta H}{H_{Si}} \qquad \varepsilon_{zz}^0 = \frac{-\Delta L}{L_{Si}} \qquad (1)$$

L'extraction de ΔH et ΔL est faite graphiquement comme on peut le voir en exemple sur la Figure IV- 4.

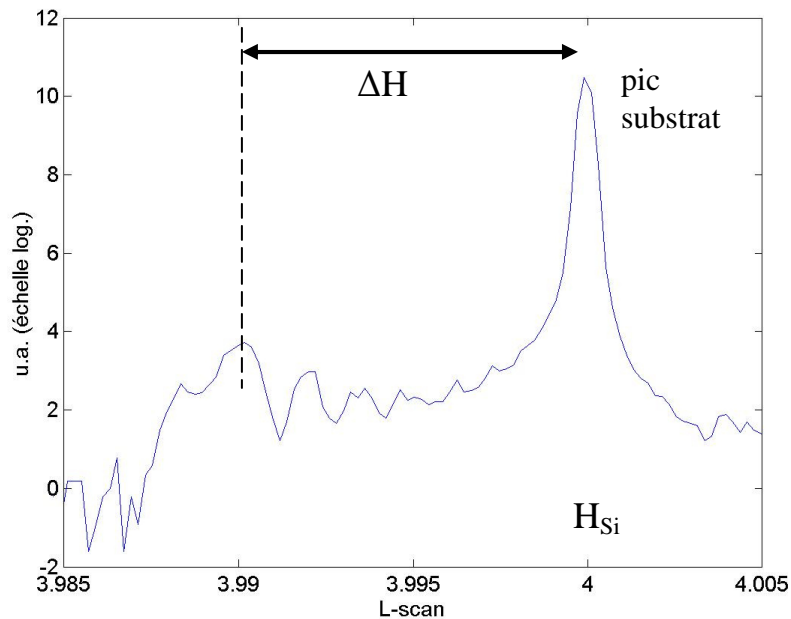


Figure IV- 4: Extraction de la valeur de ΔH à partir d'un L-scan en $H=0$ sur la cartographie 004 de la Figure IV- 2a pour l'échantillon STI-Std.

Sur les 2 cartographies de la Figure IV- 2, on observe que le pic secondaire est positionné à des valeurs plus faibles de L par rapport au pic du substrat de Si. Sur la Figure IV- 2b, sa position est $L=3,9938$, ce qui correspond à une déformation de $1,55 \cdot 10^{-3}$ suivant la direction z. Sur la cartographie 2a, la position du pic secondaire est $L=3.9903$, ce qui signifie que la déformation moyenne pour le procédé STI-Std, égale à $2,43 \cdot 10^{-3}$. A l'aide des cartographies asymétriques 404, on peut également obtenir les valeurs des déformations suivant la direction x (voir Tableau IV- 1). On remarque qu'elles sont également plus élevées pour le STI-Std en fin de procédé que pour le procédé SA-STI.

Des mesures ont alors été réalisées sur un échantillon STI-Std prélevé en cours de fabrication afin d'identifier quelles étapes introduisent les déformations. Cet échantillon (nommé STI-Std_{inter}, voir Figure IV- 1) est extrait après les étapes de gravure du silicium et remplissage des tranchées, il n'a pas subi la formation de l'oxyde tunnel et les recuits qui ont lieu en fin de fabrication. On rappelle que pour le procédé SA-STI, ces étapes sont réalisées en pleine plaque, avant la fabrication des tranchées. Le Tableau IV- 1 rassemble les déformations mesurées et les contraintes associées ainsi que la contrainte résolue maximale au centre de l'active (σ_{RSS}) pour les 3 échantillons : STI-Std_{inter}, STI-Std et SA-STI.

	STI-Std _{inter} (après gravure)	STI-Std (fin de procédé)	SA-STI (fin de procédé)
ϵ_{xx}^o	$-1,55*10^{-3}$	$-2,55*10^{-3}$	$-1,68*10^{-3}$
ϵ_{zz}^o	$1,58*10^{-3}$	$2,47*10^{-3}$	$1,56*10^{-3}$
σ_{xx} (MPa)	-166	-267	-182
σ_{yy} (MPa)	-1	-51	-8
σ_{zz} (MPa)	161	249	151
σ_{RSS} (MPa)	133	211	136

Tableau IV- 1: Déformations et contraintes pour les échantillons STI-Std après gravure, STI-Std en fin de procédé et SA-STI en fin de procédé.

Comme on peut le constater d'après les valeurs rassemblées dans le tableau, pour les deux procédés, le silicium est déformé positivement suivant la verticale z (maille allongée) et négativement suivant la direction x, perpendiculaire aux lignes de silicium. La Figure IV- 5 représente schématiquement l'état de déformation de la maille du silicium dans les lignes.

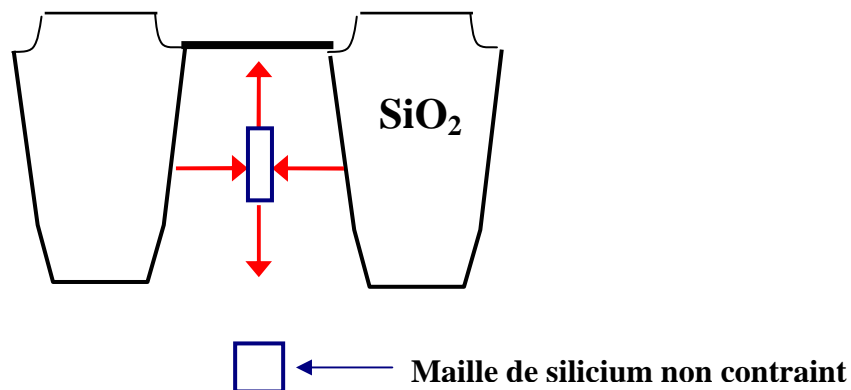


Figure IV- 5: Représentation schématique de l'état de déformation des régions actives de silicium.

A la fin de toutes les étapes le constituant, le procédé STI-Std aura introduit ~55 % de déformations supplémentaires par rapport au procédé SA-STI. Les contraintes sont également plus élevées dans le procédé STI-Std et on voit apparaître des contraintes en compression le long des lignes qui ne sont visibles pour aucun autre échantillon.

Il est aussi intéressant de voir que les contraintes « intermédiaires », mesurées après gravure dans le procédé STI-Std (STI-Std_{inter}) sont très proches, et même légèrement inférieures suivant x, aux contraintes en fin de procédé SA-STI. En effet, on rappelle que la principale différence entre le procédé SA-STI et STI-Std réside dans l'ordre de réalisation de certaines étapes (formation de l'oxyde tunnel, implantations, recuits), qui sont faites soit avant (SA-STI), soit après la gravure (STI-Std). On en déduit que ces étapes introduisent très peu de déformations et de contraintes lorsqu'elles sont effectuées sur une pleine plaquette (avant gravure) comme c'est le cas pour le SA-STI. Ces mêmes étapes introduisent alors beaucoup plus de déformations moyennes après la gravure : $-1*10^{-3}$ supplémentaire suivant la direction

x et $0,9 \cdot 10^{-3}$ suivant la direction z. Elles sont donc plus néfastes quand elles sont réalisées sur les lignes de silicium déjà gravées.

Rappelons que dans le Tableau IV- 1, σ_{RSS} est la contrainte résolue au centre de l'active et qu'il y a un rapport de $\sim 1,5$ entre la contrainte en centre et la contrainte maximale dans la ligne d'active (située dans les coins supérieurs). Ces valeurs sont en accord avec la littérature [Dom99, Liu04, Arg04, Sug06] ou légèrement plus élevées, comparées à [Arm01] ou [Stu01]. Mais il y a possibilité de relaxation des contraintes lors de la préparation des échantillons pour ces derniers (voir paragraphe II-2.1 sur la microscopie à transmission).

Si on se réfère au paragraphe I-2.4 (plasticité du silicium), les contraintes résolues sont suffisantes dans les deux procédés pour faire glisser les dislocations mais elles auront cependant plus de facilités à se développer dans le procédé STI-Std où les contraintes sont plus élevées.

Une campagne de mesures par microscopie à balayage a été réalisée sur des échantillons issus des 2 procédés pour compléter l'étude par diffraction X. Ces mesures n'ont cependant pas été faites sur les structures mesurées par HR-XRD mais sur des structure-tests un peu plus complexes avec des formes différentes mais de même technologie. La préparation des échantillons a consisté en un bain de HF pour dissoudre toutes les couches déposées sur le substrat de Si, suivi d'un nettoyage de l'échantillon (ou 'replicate'). Enfin l'échantillon est plongé quelques secondes dans une solution de 'wright etch'. Le 'wright etch' est un mélange assez agressif permettant la révélation des dislocations. Sa composition (pour 240mL) est la suivante :

- 2g $\text{Cu}(\text{NO}_3)$ dilue dans 60mL H_2O
- 60ml HF (48%)
- 30mL HNO_3 (69%)
- 30mL de CrO_3 5M
- 60 mL d'acide acétique (CH_3COOH)

Dans le cas d'un repère cristallographique, il existe pour chaque plan de glissement un vecteur de burgers \vec{b} pour lequel les contraintes résolues sont maximales (voir paragraphe 2.4 du chapitre I). Les échantillons étant fabriqués sur des plaquettes de silicium orientées (001), les plans denses coupent le plan (001) suivant les directions $[110]$ et $[1\bar{1}0]$.

Pour le procédé STI-Std, nous avons pu révéler de nombreuses dislocations dans les plans denses du silicium sur plusieurs structure-tests, comme on peut le voir sur la Figure IV- 6. La Figure IV- 7 montre les photos MEB de la même structure fabriquée avec le procédé SA-STI (gauche) et le procédé STI-Std (droite). Nous voyons que les structures élaborées avec le procédé SA-STI ne présentent aucune dislocation à l'échelle d'observation alors que les structures issues du procédé STI-Std en présentent de très nombreuses.

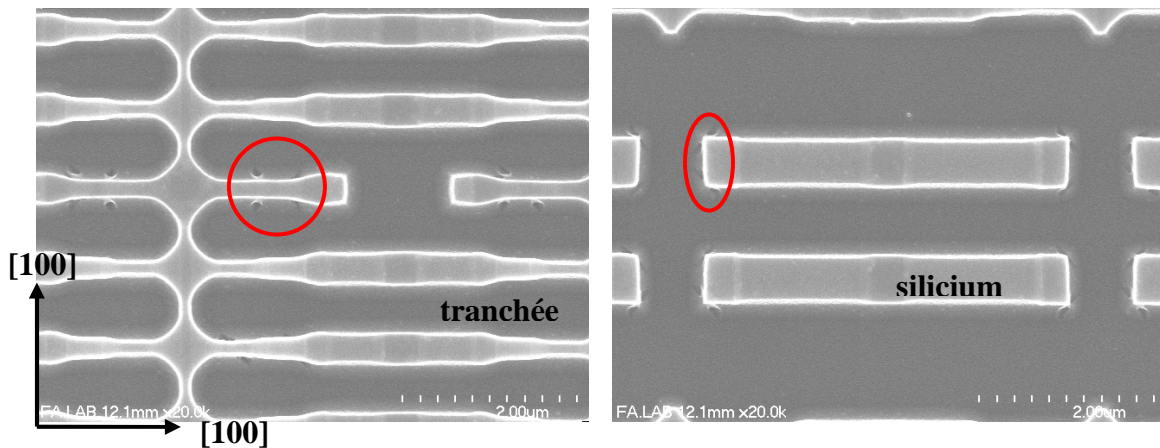


Figure IV- 6: Photo en vue de dessus prise au MEB des structure-tests STI-Std montrant des dislocations révélées à l'aide d'une solution appelée 'wright etch'.

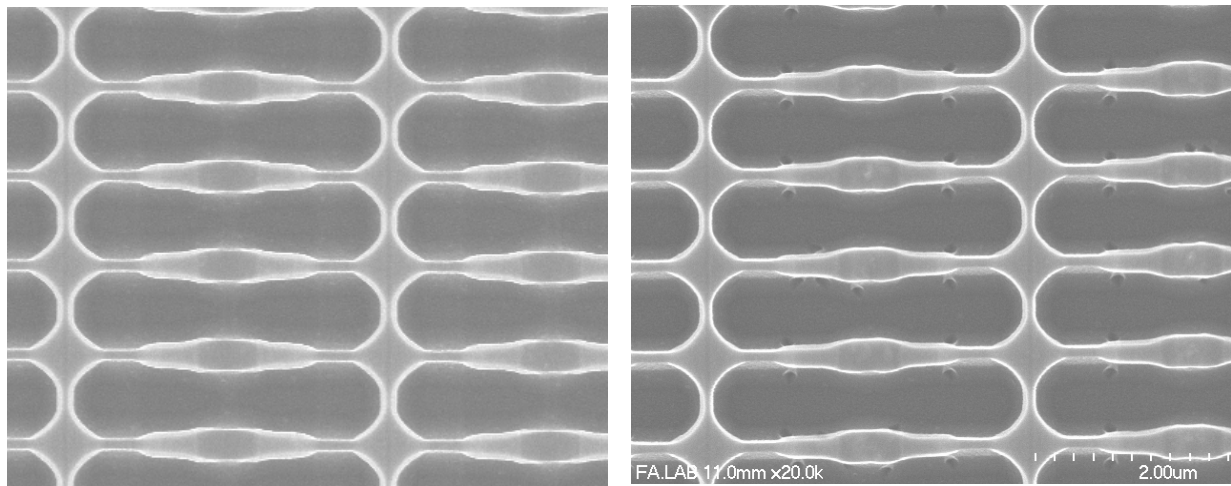


Figure IV- 7: Photo en vue de dessus prise au MEB sur les mêmes structures fabriquées avec le procédé SA-STI (à gauche) et avec le procédé STI-Std (à droite).

Le procédé STI-Std introduit donc plus de contraintes localement dans le silicium que le procédé SA-STI et engendre de nombreuses dislocations. Les mesures par microscopie à balayage conduisent donc aux mêmes conclusions que les mesures par diffraction à savoir que le procédé STI-std est plus néfaste pour le Si. Il est également possible que l'ordre de réalisation des étapes dans le procédé STI-std permette de nucléer d'avantages de dislocations. Celles-ci se déplaceront d'autant plus facilement sous l'effet d'un champ de contraintes plus élevé.

Au-delà des mesures de déformations et de la comparaison de ces 2 procédés par microscopie, nous avons voulu connaître l'origine de ces dislocations dans le procédé STI-Std. Après observation des clichés MEB, nous nous sommes rendus compte que dans ces structure-tests de type mémoire, les dislocations apparaissent très souvent au même endroit sur l'active de silicium. La Figure IV- 8 montre une comparaison à la même échelle d'un cliché MEB et d'une représentation informatique des différentes couches du produit. On peut mettre en évidence une ligne où apparaît la majorité des dislocations. Cette ligne se trouve au bord des zones d'implantation BN^+ .

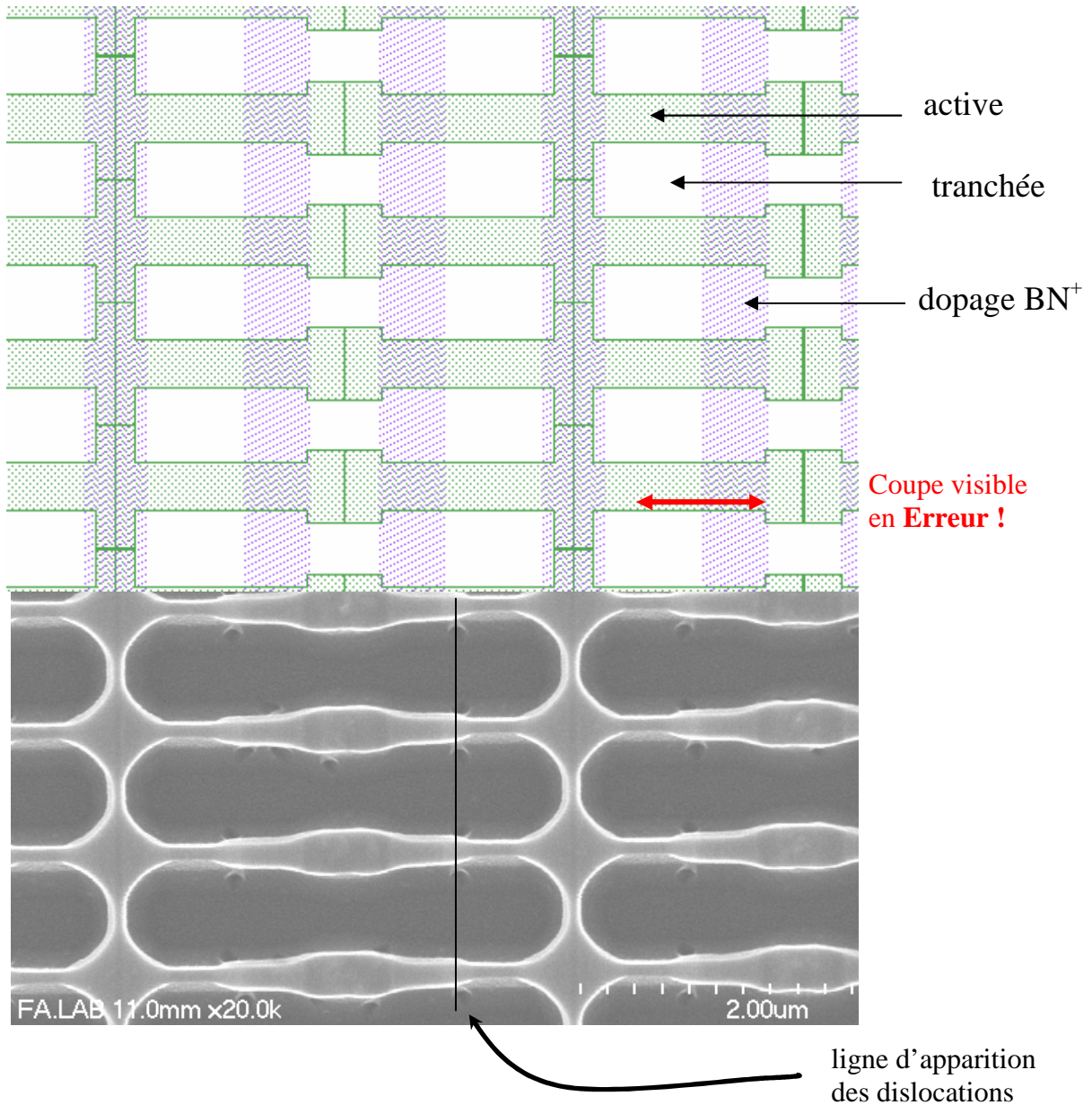


Figure IV- 8: Comparaison d'un cliché MEB en vue de dessus d'une structure de type mémoire avec une représentation informatique des différentes couches du produit STI-Std (à la même échelle).

Nous avons ainsi pu localiser la zone qui semble favoriser l'apparition des dislocations. Cependant l'apparition des dislocations n'est pas systématique dans les structures visibles sur la Figure IV- 8. En effet, ces structures sont fabriquées suivant 2 variantes qui introduisent de petites différences en terme d'épaisseur des couches. La Figure IV- 9 montre des coupes schématiques du produit pour les 2 variantes (la position de la coupe est représentée sur la Figure IV- 8). On voit que l'oxyde présent sous le bord du bloc de nitrure (appelé aussi 'spacer') n'a pas la même épaisseur (350 Å ou 85 Å selon les variantes), à l'endroit même où se forment les dislocations. Pour les échantillons avec un oxyde de 85 Å, des dislocations se forment sur chaque active de silicium (Figure IV- 8). Lorsque l'oxyde mesure 350 Å, les dislocations apparaissent toujours au même endroit mais beaucoup moins fréquemment qu'avec un oxyde de 85 Å.

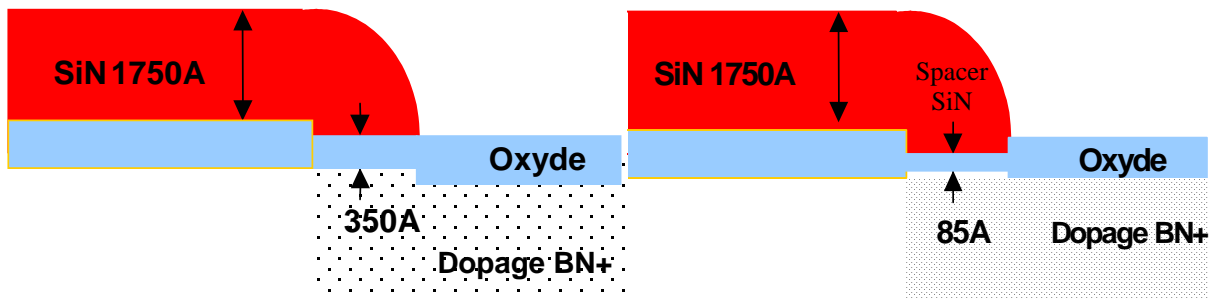


Figure IV- 9: Coupes schématiques montrant les épaisseurs des couches de la structure-test de la Erreur !
Source du renvoi introuvable. pour les 2 variantes possibles.

Suite à ce résultat, des structures ont été fabriquées pour essayer de confirmer ces conclusions par des mesures de diffraction X haute-résolution, à savoir qu'un oxyde plus fin sous le nitrure génère plus de contraintes dans les lignes de silicium. Ces échantillons avaient la même géométrie que ceux mesurés habituellement en diffraction X mais avec des bandes de nitrure perpendiculairement aux lignes de silicium. Un des échantillons présentait un oxyde fin (85 Å) sous le 'spacer' des bandes de nitrure et un autre avait un oxyde épais (350 Å). Ces mesures n'ont malheureusement pas donné de résultats exploitables. Cela peut s'expliquer par deux raisons : les bandes de nitrure perpendiculaires aux lignes n'étaient pas déposées de façon périodique ce qui rend très difficile l'exploitation des mesures de diffraction ; d'autre part les 'spacers' étant très fins, les déformations qu'ils induisent n'étaient probablement pas mesurables.

Pour conclure sur cette comparaison de procédé, nous avons montré grâce aux mesures de diffraction haute résolution sur des réseaux parfaits que le procédé SA-STI introduit moins de déformations et de contraintes au milieu des lignes de Si que le procédé STI standard. Les mesures sur l'échantillon STI-Std_{inter} (procédé STI-Std après gravure) nous ont permis d'apprendre que les étapes telles que la formation de l'oxyde tunnel, les implantations et les recuits sont globalement beaucoup plus néfastes lorsqu'elles sont réalisées sur des lignes de silicium déjà gravées plutôt que sur des plaquettes entières.

Les clichés MEB sur des structure-tests (plus complexes que les structures élaborées pour les mesures de diffraction) des 2 procédés nous ont permis de révéler de nombreuses dislocations sur les structures fabriquées avec le procédé STI-Std qui n'apparaissent pas avec le procédé SA-STI. Sur ces structure-tests, il apparaît que le procédé de fabrication des tranchées STI-Std introduit également plus de contraintes qui sont à l'origine de l'apparition des dislocations. Le procédé SA-STI présente donc 2 avantages : les couches déposées avant gravure sont alignées avec la tranchée, ce qui est le principe de cette technique et le silicium est nettement moins déformé, limitant ainsi l'apparition de défauts.

Une étude plus approfondie des mesures MEB pour les échantillons de type STI-Std nous a permis de localiser les dislocations sous le 'spacer' de nitrure permettant la réalisation de l'oxyde tunnel. Par comparaison des 2 variantes de l'échantillon, nous avons également appris qu'un des paramètres déterminant dans la formation des dislocations est l'épaisseur d'oxyde sous ce 'spacer'. Plus cet oxyde est fin, plus les dislocations sont fréquentes. Un mécanisme plausible serait que les contraintes induites par le nitrure se transmettent plus facilement à travers l'oxyde fin.

2. Etude des étapes individuelles du procédé SA-STI

Afin de comprendre quelles étapes sont responsables de l'apparition des déformations, des échantillons ont été prélevés à 4 étapes représentatives du procédé SA-STI. Les échantillons sont décrits ci-dessous et les étapes de prélèvement sont également indiquées sur la Figure IV- 1.

Etape 1 : La première étape se situe juste après la gravure du silicium. On trouve sur l'active de silicium les oxydes de grille, du poly-silicium, du nitrure et un oxyde. Ces couches sont déposées en début de procédé afin que la gravure de ces couches soit alignée. Il s'agit d'une des spécificités du procédé SA-STI.

Etape 2 : Le second échantillon est retiré après l'oxydation thermique à haute température (1050°C) qui forme un oxyde fin ('liner') de 15 nm sur les flancs des tranchées.

Etape 3 : A l'étape 3, les tranchées sont remplies d'oxyde de silicium par dépôt HDP (High Density Plasma) isolant ainsi les régions actives de silicium entre elles. Le dépôt est suivi d'une planarisation mécano-chimique de la surface qui s'arrête au niveau du nitrure.

Etape 4 : L'échantillon subit enfin un recuit à 850°C afin de densifier l'oxyde de remplissage et d'améliorer sa capacité d'isolation.

Nous allons à présent interpréter les cartographies de l'espace réciproque sur des échantillons de période 580 nm (et $b=240$ nm) pour les quatre étapes décrites ci-dessus. Toutes les cartographies ont été mesurées avec l'optique Dumond-Bartels.

La Figure IV- 10 représente une cartographie 404 à l'étape 1 du procédé SA-STI. On voit principalement le pic de diffraction du substrat de Si non déformé au centre de la cartographie. Les satellites suivant la direction H, liés à la période, sont également bien visibles. L'enveloppe du signal diffracté est presque centrée sur le pic de Bragg du silicium. La légère asymétrie indiquerait une très faible déformation dans les lignes de silicium.

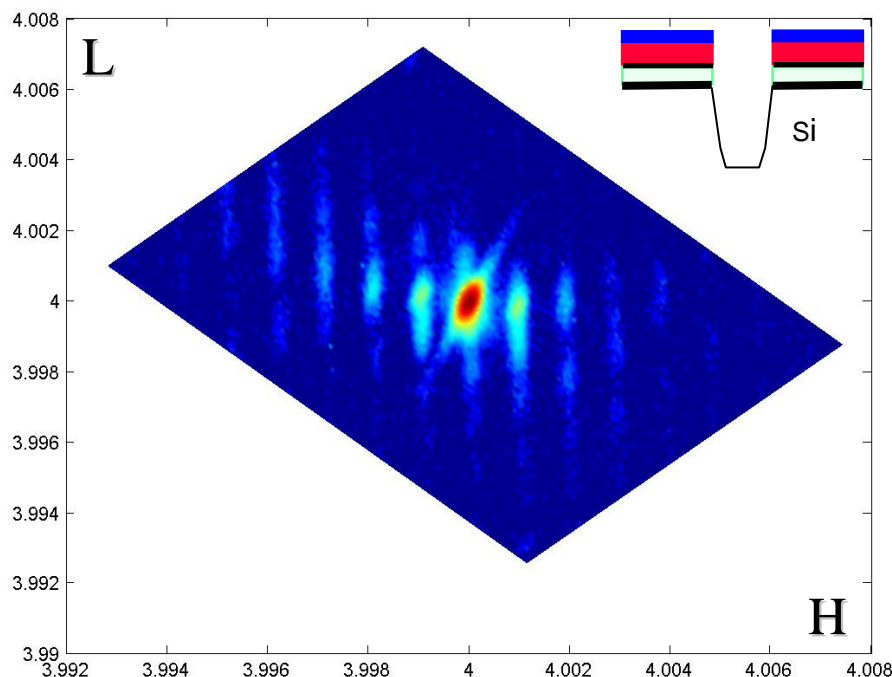


Figure IV- 10: Cartographie 404 du silicium après gravure (étape 1). $p=580$ nm, $b=240$ nm.

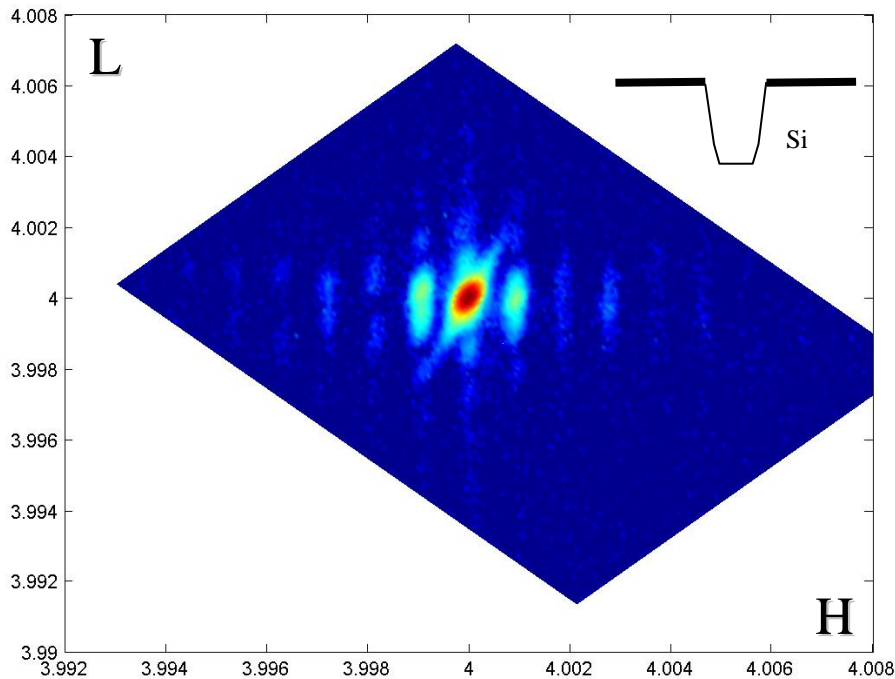


Figure IV- 11: Cartographie 404 après gravure des tranchées et retrait des couches déposées sur l'active. $p=580$ nm, $b=240$ nm.

Pour s'assurer qu'il ne s'agit pas d'un artefact de mesure, les couches déposées sur l'active sont retirées par gravure chimique dans un bain de HF et une nouvelle mesure est réalisée. La Figure IV- 11 montre la cartographie 404 après retrait du nitrure et du poly-silicium et des oxydes de grille par gravure. A présent la cartographie est parfaitement symétrique et les satellites sont alignés suivant la direction H et centrés sur le pic du substrat. On a donc pu observer sur la Figure IV- 10 l'effet des déformations induites par les couches qui étaient déposées sur les lignes de silicium. La Figure IV- 11 est donc équivalente à la Figure III- 5 mais mesurée avec l'optique Bartels. Le rapport signal/bruit est donc beaucoup moins bon qu'avec l'optique hybride.

La Figure IV- 12 représente la cartographie 404 de l'échantillon prélevé après l'étape 2. On remarque que les satellites sont maintenant décalés par rapport au substrat car l'asymétrie est plus marquée. Le satellite d'ordre +1 par rapport au substrat montre une surintensité qui apparaît vers des valeurs de L plus faibles et de H plus grandes. Cela signifie que les déformations qui apparaissent dans les lignes de Silicium sont positives suivant l'axe z et négatives suivant x. Le décalage n'étant pas très élevé (ΔL et $\Delta H < 0,002$), les déformations ne sont pas très grandes ($< 5 \cdot 10^{-4}$).

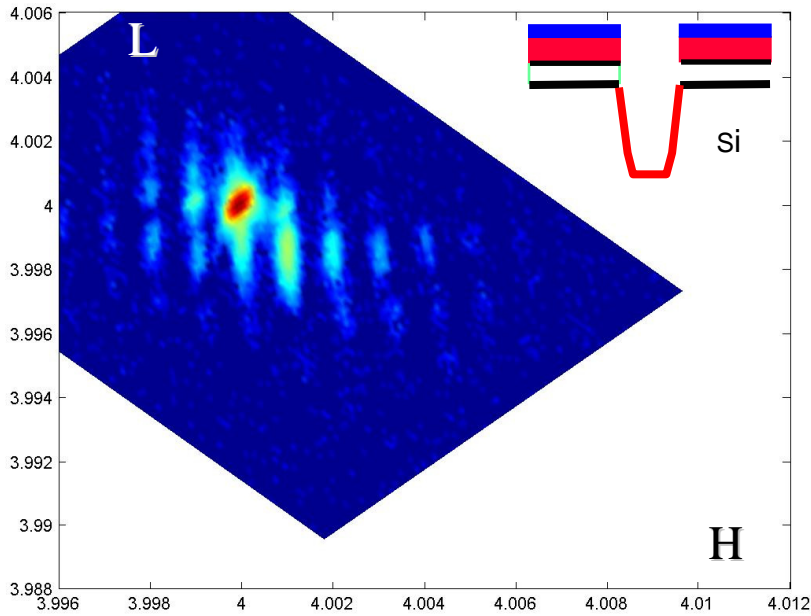


Figure IV- 12: Cartographie 404 du silicium après oxydation thermique (étape 2). $p=580$ nm, $b=240$ nm.

La Figure IV- 13 montre la cartographie 404 de l'échantillon après remplissage des tranchées et CMP. Après la troisième étape, l'enveloppe des satellites n'est plus centrée sur le pic de Bragg. On voit d'ailleurs apparaître une zone où l'intensité des satellites est plus prononcée et cela pour des valeurs plus faibles de L et plus grandes de H. Le décalage du signal est donc dans la même direction que l'échantillon précédent mais nettement plus affirmé, les déformations ont le même signe ($\epsilon_{xx} < 0$ and $\epsilon_{zz} > 0$) mais sont plus élevées. A partir de cette étape, on voit donc apparaître un pic secondaire sur la cartographie, tout comme il a été vu dans le chapitre III. Cela signifie que les déformations sont homogènes au centre de la ligne de silicium et que leurs valeurs peuvent se déduire de la position du pic secondaire. Dans ce cas, on estime les déformations à $1,7 \cdot 10^{-3}$ pour ϵ_{zz} et de $-1,85 \cdot 10^{-3}$ pour ϵ_{xx} .

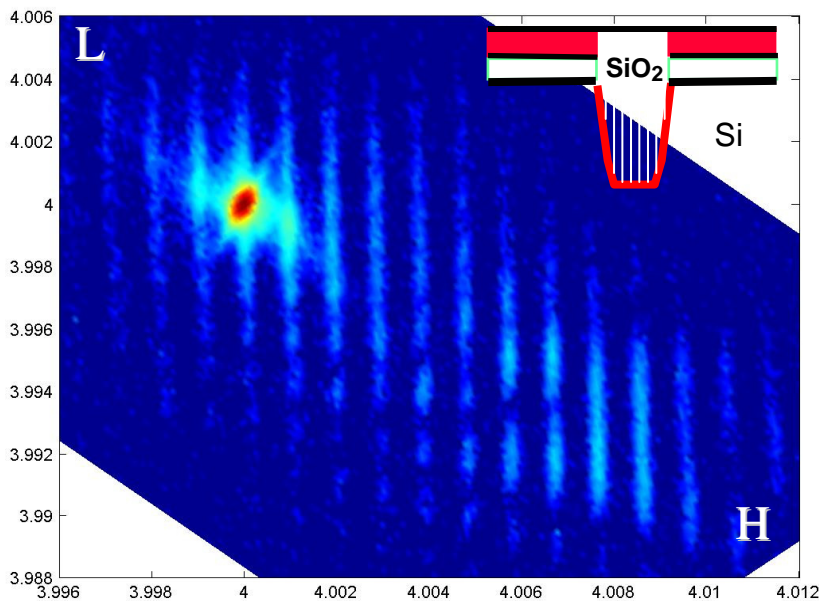


Figure IV- 13: Cartographie 404 du silicium après remplissage des tranchées et CMP (étape 3). $p=580$ nm, $b=240$ nm.

Après la densification à 850°C (étape 4), les cartographies sont similaires à celles obtenues après l'étape 3. Cela indique que l'état de déformation n'a pas été modifié de manière significative durant le recuit. Les valeurs des déformations restent donc de $1,7 \cdot 10^{-3}$ pour ϵ_{zz} et de $-1,85 \cdot 10^{-3}$ pour ϵ_{xx} .

On déduit de ces mesures que lors du procédé SA-STI et pour des échantillons de période 580 nm, l'essentiel des déformations sont introduites lors du remplissage des tranchées par HDP, diminuant ainsi la taille de la maille suivant la direction x et l'allongeant suivant z. Cette étape est considérée par beaucoup comme l'étape la plus critique dans le procédé d'isolation STI [Par97, Kim98, Sai98]. En effet, l'oxyde de remplissage des tranchées possède un coefficient de dilatation thermique plus petit que celui du silicium et les déformations sont ainsi majoritairement introduites lors du refroidissement. Il est également intéressant de voir que la technique de mesure est suffisamment sensible pour observer les faibles déformations induites par les couches déposées sur les lignes de silicium avant la gravure ($< 5 \cdot 10^{-4}$).

3. Etude du matériau de remplissage des tranchées

Le paragraphe 2 a mis en évidence que dans le procédé SA-STI, la majorité des déformations induites dans le silicium provenait de l'étape de remplissage des tranchées avec l'oxyde d'isolation. Nous allons exposer les résultats obtenus avec d'autres oxydes de remplissage des tranchées que l'oxyde HDP qui est habituellement utilisé dans le procédé SA-STI.

Nous allons commencer par un oxyde TEOS (Tetra-Ethyl-Ortho-Silicate) recuit à différentes températures: 850°C et 950°C. Ces variations ont été étudiées sur des échantillons SA-STI de période 580 nm après remplissage des tranchées et retrait du poly-silicium. Enfin, des essais de mise en tension du silicium sur des échantillons de période plus petite (200 nm) seront détaillés à la fin de ce paragraphe.

3.1 TEOS/O₃ pour des périodes de 580 nm

Habituellement, les échantillons de période 580 nm ont un remplissage des tranchées par la technique appelée HDP (Figure IV- 14a). Nous avons observé l'effet sur les déformations d'un remplissage TEOS/Ozone [Bry94, Ish97] avec des recuits de densification de l'oxyde, soit à 850°C soit à 950°C. Ce type de matériau est particulièrement intéressant pour ces propriétés de remplissage. L'oxyde TEOS/O₃ est déposé à une température de 540°C et une pression de 600 Torr en une étape. Le débit de TEOS est de 2200 mg/min et celui de l'Ozone est de 10000 cm³/min. Les valeurs de déformation obtenues sur les cartographies expérimentales sont reportées dans le Tableau IV- 2.

Remplissage	HDP	TEOS/O ₃ Recuit 850° N ₂	TEOS/O ₃ Recuit 950° O ₂
ϵ_{xx}^o	$-2,2*10^{-3}$	$-2,6*10^{-3}$	$-2,83*10^{-3}$
ϵ_{zz}^o	$2*10^{-3}$	$1,1*10^{-3}$	$1,25*10^{-3}$
σ_{xx} (MPa)	-239	-363	-392
σ_{yy} (MPa)	-13	-96	-101
σ_{zz} (MPa)	193	17	28
σ_{RSS} (MPa)	176	155	171

Tableau IV- 2: Comparaison des valeurs de déformations dans la ligne de silicium pour différents oxydes de remplissage et températures de recuit.

Lorsque le type de remplissage est du TEOS/O₃, le champ de déformation est fortement modifié même si l'on conserve une compression suivant la direction x et une tension suivant la direction z. En effet la déformation suivant z est presque deux fois plus faible alors que celle suivant x a augmenté de 30% (Figure IV- 14b). On remarque également que pour un oxyde de type TEOS, la température du recuit a une influence non négligeable, contrairement à ce qui a été vu pour l'oxyde HDP (voir mesures de courbure en Annexe 1). Dans ce cas, le passage de 850°C à 950°C entraîne une augmentation de 10% des déformations et des contraintes résolues. En effet, les oxydes TEOS sont moins denses que les oxydes HDP, ils sont donc plus sensibles aux températures élevées [Til06].

Les contraintes résolues varient peu d'un oxyde de remplissage à l'autre. L'oxyde HDP contraint tout de même légèrement plus le silicium que l'oxyde TEOS/O₃, surtout si celui-ci n'est pas recuit à trop haute température. D'un point de vue mécanique, l'oxyde introduisant le moins de contrainte est donc l'oxyde TEOS/O₃ avec un recuit à 850°C sous N₂. A ces températures, c'est également l'oxyde le moins dense.

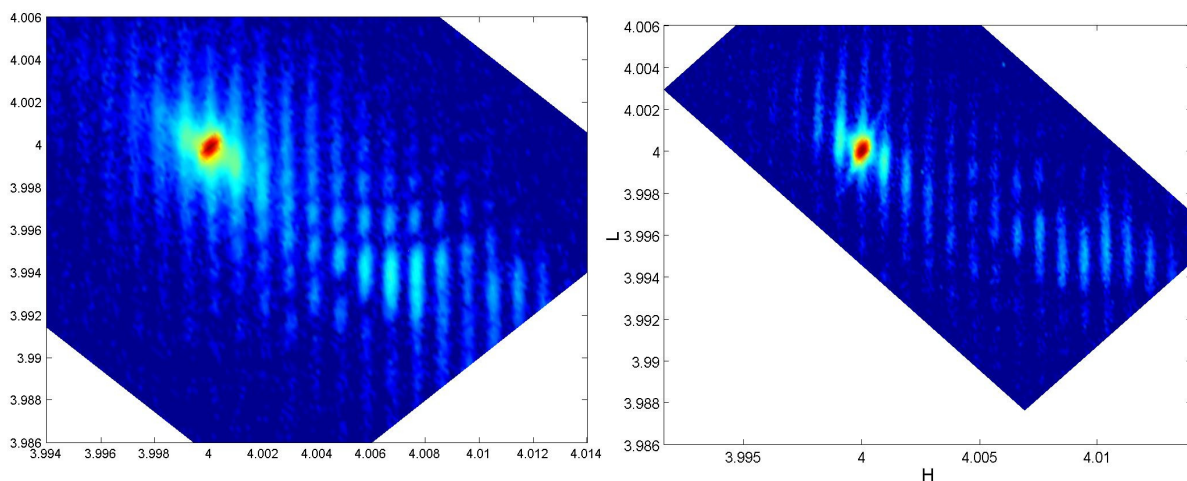


Figure IV- 14: Cartographie 404 du Silicium pour un échantillon standard HDP recuit à 850°C (a) et pour un échantillon avec un remplissage de type TEOS avec un recuit de 950°C. Mesures avec un monochromateur Dumond-Bartels. $p= 580$ nm.

Il est à noter que seules les étapes de remplissage et de recuit diffèrent entre ces 3 échantillons. Par contre, les déformations mesurées ici pour l'échantillon HDP sont différentes de celles mesurées dans le paragraphe précédent ($\epsilon_{zz} = 1,7 \cdot 10^{-3}$ et $\epsilon_{xx} = -1,85 \cdot 10^{-3}$). Cet échantillon a vu une modification récente du procédé : le Top Corner Rounding (TCR). Cette étape consiste à modifier les coins supérieurs des zones d'actives (cercle rouge sur la Figure IV- 20) pour limiter les contraintes à la surface et éviter les amincissements des oxydes de grille en bord d'active. La réalisation du TCR entraîne alors une légère augmentation de la largeur de la ligne de Silicium. Nous voyons ici, qu'il entraîne ainsi une diminution d'environ $0,3 \cdot 10^{-3}$ des déformations dans la ligne.

3.2 Mise en tension du silicium

Plusieurs essais ont été réalisés afin d'inverser le signe des déformations dans la ligne de silicium, et ce pour des échantillons de période 200 nm. Le but était d'obtenir des déformations positives suivant la direction x (horizontalement) et négatives suivant la direction z (verticalement). Deux matériaux ont été proposés pour remplacer l'oxyde déposé par HDP dans les tranchées. Le premier est à nouveau un oxyde déposé par TEOS/Ozone mais dans des conditions particulières et différentes du paragraphe précédent. Dans ce cas, cet oxyde est aussi appelé HARP pour 'High Aspect Ratio Process'. Il peut théoriquement remplir les tranchées fines et très profondes sans former de trous ('voids' en anglais) au milieu de celles-ci. Le deuxième matériau est le tungstène (W). Il est à noter que ce dernier n'a pas pour vocation de remplacer l'oxyde HDP et d'être utilisé dans un procédé réel, il a uniquement été employé ici pour tenter de mettre le silicium en tension dans la direction x.

A titre d'information, pour ces mesures, le masque en Mo a été remplacé par un masque en inox. En effet, sur les cartographies 004, l'oxyde de Mo diffuse à des valeurs de L légèrement plus grandes que le silicium. Par conséquent, il peut masquer le signal provenant du silicium déformé en compression.

3.2.1 Remplissage des tranchées avec l'oxyde TEOS/O₃ de type HARP

Le remplissage des tranchées a été fait avec un oxyde de silicium déposé en utilisant du TEOS/O₃ ou HARP. Dans ce cas, l'oxyde est déposé en 2 étapes à T= 540 °C et P= 600 Torr. Le débit d'Ozone est fixe à 12000 cm³/min et le débit de TEOS varie de 500 à 1200 mg/min durant la première partie et reste constant à 1200 mg/min dans la deuxième partie. Cet oxyde a pour caractéristique d'être en tension lorsqu'il est déposé en pleine plaque [Arg04, Til06], contrairement à l'oxyde HDP. Il a cependant tendance à absorber l'eau contenue dans l'air ambiant et à redevenir compressif. Pour éviter ce phénomène, un deuxième oxyde a été déposé par-dessus l'oxyde HARP pour l'isoler de l'atmosphère extérieure et pour qu'il reste dans son état initial en terme de contraintes (voir Figure IV- 15 d'une coupe de l'échantillon mesuré).

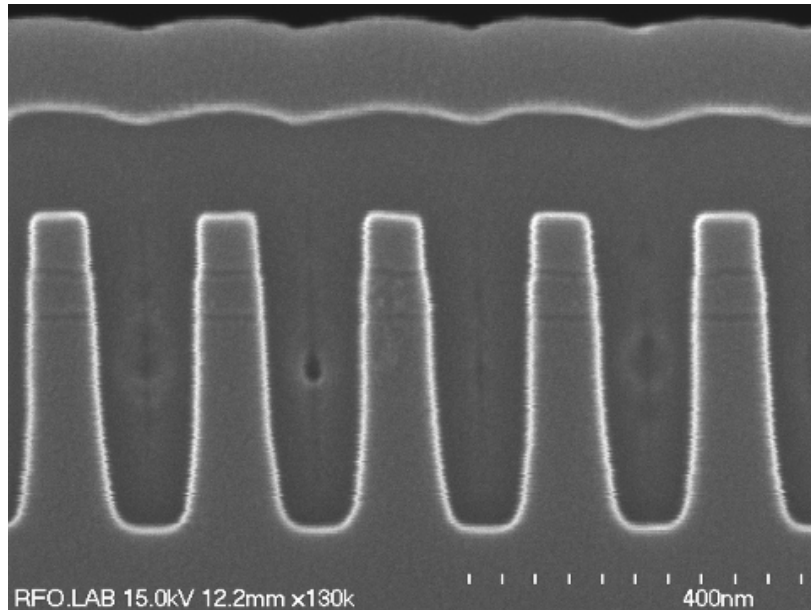


Figure IV- 15: Coupe MEB d'un échantillon de période 200 nm rempli avec un oxyde de type HARP et recouvert d'un second oxyde pour l'isoler de l'atmosphère extérieure.

On remarque aussi sur la Figure IV- 15 la formation de trous au centre des tranchées. Ces trous sont certainement dus à la préparation chimique de l'échantillon avant la Microscopie à balayage, qui a du attaquer l'oxyde au centre des tranchées (là où il est le moins dense). La Figure IV- 16 montre la cartographie 004 (gauche) et 224 (droite) mesurée sur cet échantillon.

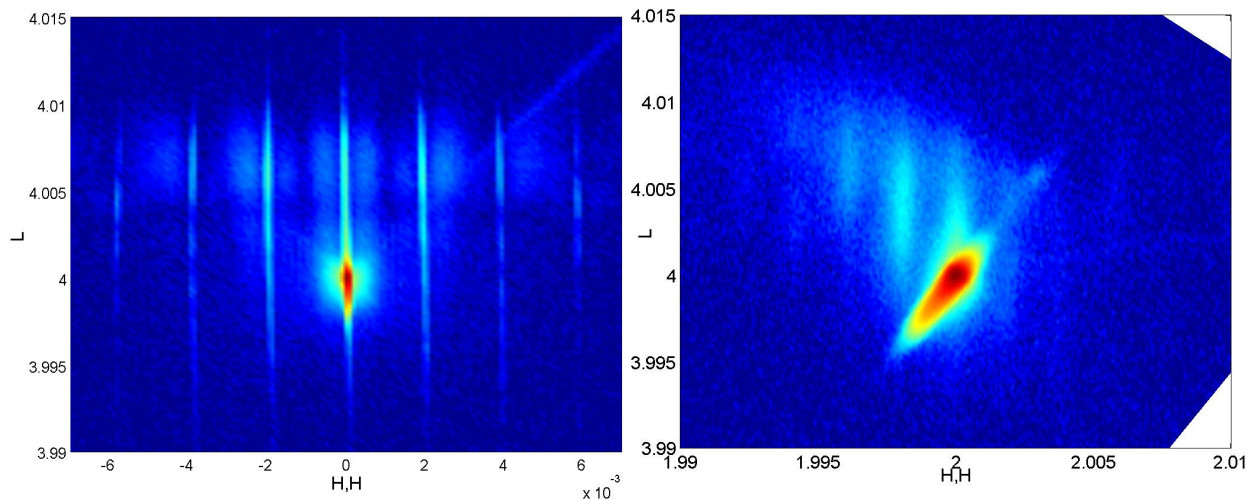


Figure IV- 16: Cartographie 004 (gauche) et 224 (droite) du Silicium. Remplissage des tranchées avec du SiO₂ déposé à l'aide de TEOS-ozone. Mesure avec optique hybride. p= 200 nm.

En comparant la Figure IV- 16 à des cartographies d'échantillon standard (remplissage HDP, par exemple la Figure IV- 2), on remarque qu'elle est en quelque sorte 'inversée'. Le décalage du signal diffracté par les zones déformées se fait dans ce cas vers des valeurs plus grandes de L, indiquant une déformation négative suivant la direction z au lieu de positive habituellement. Sur la cartographie 224, on voit que les déformations dans la direction x sont

également opposées à ce qui est observé pour tous les autres échantillons c'est à dire positives.

Avec le remplissage TEOS/O₃ de type HARP, le silicium dans les lignes est donc déformé négativement suivant la direction z et positivement suivant la direction x. Cet état de déformation est opposé par rapport à ceux mesurés précédemment. Les cartographies ne montrent par contre pas de pic de diffraction clairement séparé, les déformations ne sont probablement pas homogènes au centre de la ligne.

3.2.2 Remplissage des tranchées avec W

La Figure IV- 17 montre une photo MEB de l'échantillon. On voit que le W a principalement été déposé dans les tranchées et non sur l'active de silicium et qu'il n'y a pas de 'voids'. Nous devrions dans ces conditions voir une mise en tension du silicium suivant la direction x car les contraintes résiduelles du W sont de ~1 GPa (par mesure de courbure).

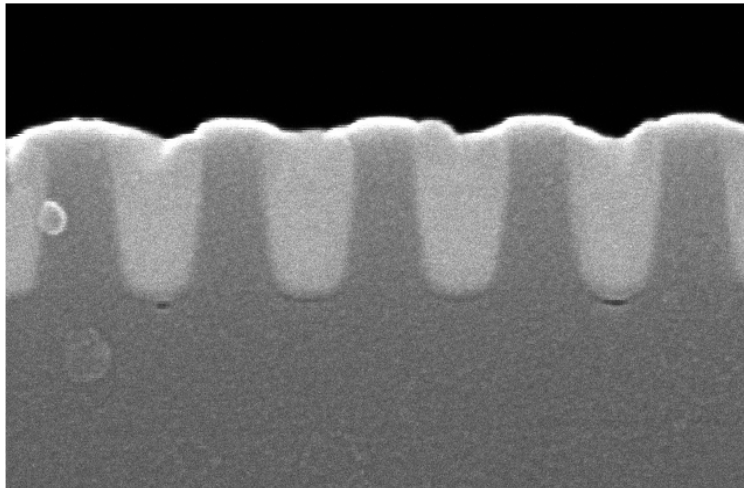


Figure IV- 17: Photo MEB du remplissage des tranchées avec du W.

La Figure IV- 18 représente la mesure de la raie 004 du silicium pour l'échantillon montré en Figure IV- 17. On remarque sur la cartographie que le signal est très faible autour du pic de Bragg et que les satellites sont à peine visibles. On ne peut attribuer ce faible signal à l'absorption des rayons X par le W car la longueur d'atténuation du W à 8 keV est de ~3 μm [Hen]. Celle-ci est trop importante pour entraîner une telle diminution de l'intensité des satellites (~facteur 10).

Globalement le signal est symétrique par rapport au substrat et s'éloigne peu de celui-ci. Les déformations sont donc très faibles. La Figure IV- 19 montre un balayage suivant la direction L, lorsque l'on étudie ce balayage en H, H = 0, on constate que celui-ci n'est pas symétrique. On remarque un allongement du signal pour des valeurs plus grandes de L. Cela indique de légères déformations négatives suivant la direction z. On remarque également une surintensité visible pour L = 4,004. Il s'agit d'un artefact dû à un phénomène de transmission à travers le réseau [Gai93, Lou06].

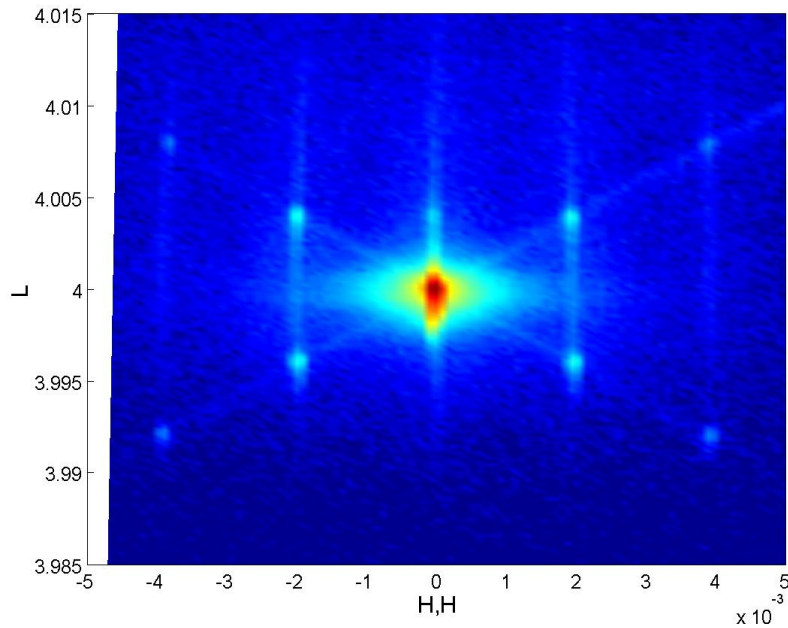


Figure IV- 18: Cartographie 004 du Silicium. Remplissage des tranchées avec du W. p= 200 nm.

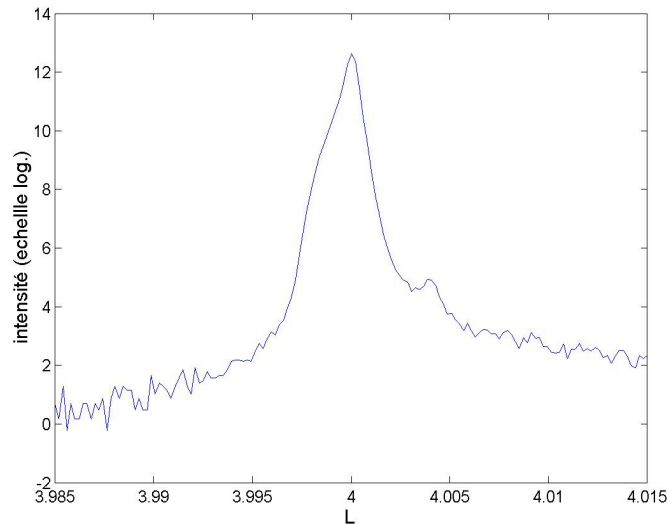


Figure IV- 19: Balayage suivant la direction L de l'espace réciproque pour H,H=0.

La faible intensité générale des satellites pourrait provenir d'un endommagement important du silicium par le dépôt de W. De plus, la relaxation du silicium expliquerait aussi pourquoi l'échantillon présente si peu de déformations élastiques alors que les dépôts de W sont normalement très fortement en tension (1 GPa pour un dépôt pleine plaque mesuré par courbure). Nous avons donc essayé de révéler d'éventuelles dislocations dans le silicium par la méthode décrite dans le paragraphe 1. Le retrait du W des tranchées STI n'a cependant pas été facile à réaliser et la préparation de l'échantillon a consommé du silicium et modifié la géométrie des lignes. Nous n'avons donc pas pu conclure sur cet échantillon. Des mesures par microscopie à transmission permettraient de vérifier la présence ou non de dislocations mais cette expérience n'a pas pu être réalisée, faute de temps.

4. Variations géométriques

Dans un premier temps, nous allons voir dans ce paragraphe l'effet de la géométrie de la ligne de silicium sur les déformations en faisant varier la largeur des lignes (b), l'épaisseur du 'liner' (e) et la profondeur des tranchées (h). Une meilleure connaissance de l'effet de ces variables permettra une optimisation de ces différents paramètres afin d'éviter des déformations et contraintes trop fortes. La Figure IV- 20 rappelle les dimensions caractéristiques des échantillons et leurs notations:

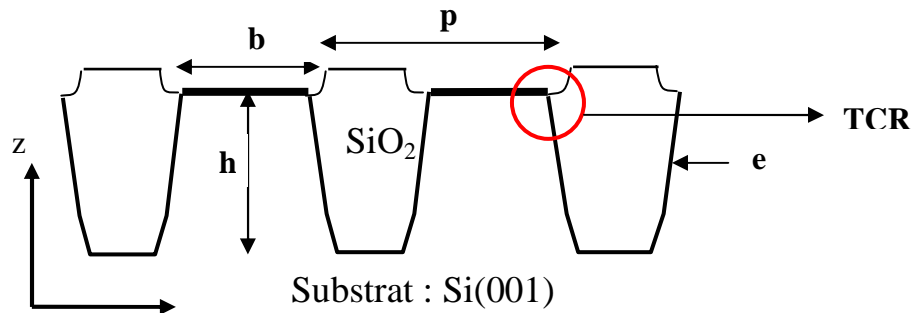


Figure IV- 20: Schéma représentant les variations géométriques possibles sur les échantillons étudiés. p est la période, b la largeur des lignes, h la profondeur des tranchées et e l'épaisseur du liner et TCR le Top Corner Rounding.

4.1 Largeur des lignes (b)

Nous comparons ici des échantillons SA-STI de période 580 nm et de largeur de ligne $b=240$ nm et $b=340$ nm. La position du pic secondaire sur les cartographies a été utilisée pour obtenir les valeurs de déformations données dans le Tableau IV- 3. Les cartographies ne sont pas montrées ici.

Déformation Largeur des lignes	\mathcal{E}_{xx}^o	\mathcal{E}_{zz}^o
$b = 240$ nm	$-1,68 \cdot 10^{-3}$	$1,56 \cdot 10^{-3}$
$b = 340$ nm	$-1,45 \cdot 10^{-3}$	$1,2 \cdot 10^{-3}$

Tableau IV- 3: Valeurs des déformations suivant l'axe x et z pour deux largeurs d'active (b) pour $p = 580$ nm.

Les résultats montrent que le silicium est d'autant plus déformé que la région active est petite. Pour une augmentation de $\sim 40\%$ de la taille de la ligne, on a une diminution des déformations de 14 % suivant la direction x et 23 % suivant la direction z .

Une étude du paramètre b a été réalisée par éléments finis dans le chapitre I. Les simulations ont été refaites ici avec les valeurs géométriques correspondant aux échantillons mesurés expérimentalement. Celles-ci sont représentées en Figure IV- 21, cependant elles prédisent une diminution des déformations de l'ordre de 40 % pour un passage du paramètre b de 240 nm à 340 nm. On voit ici que l'effet est beaucoup moins marqué pour les mesures expérimentales.

Cela peut être dû à la nature des déformations. Dans le calcul des déformations calculées à l'aide du logiciel Femlab, l'origine des déformations et des contraintes provient uniquement de l'oxyde de remplissage et du 'liner'. Dans la réalité, les nombreuses étapes du procédé de fabrication introduisent probablement des contraintes résiduelles qui ne dépendent pas du paramètre b. Cela fausse donc les simulations et le paramètre b aura ainsi un effet 'amplifié' dans les simulations par éléments finis.

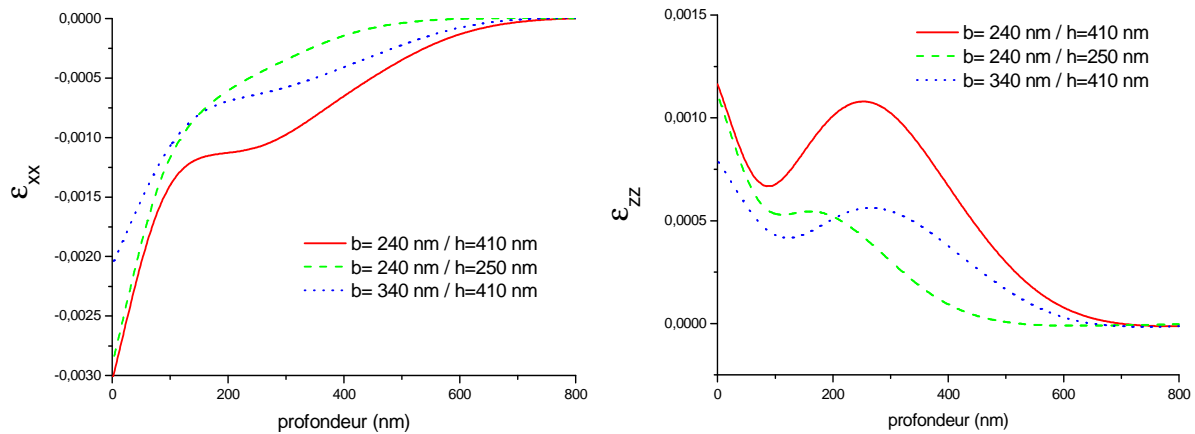


Figure IV- 21: Variation de ϵ_{xx} (à gauche) et de ϵ_{zz} (à droite) au milieu de la ligne de silicium en fonction de la profondeur pour les valeurs de b et h mesurées expérimentalement. (b = 240 nm ou 340 nm et h = 250 nm ou 410 nm)

On voit ici que les résultats de l'étude paramétrique ne sont donc pas quantitatifs. Ils peuvent cependant servir à donner une tendance qualitative de l'évolution des déformations avec le paramètre b.

4.2 Profondeur des tranchées (h) et épaisseur du 'liner' (e)

Habituellement, les échantillons de période 580 nm ont un 'liner' de 15 nm et des tranchées de 410 nm de profondeur remplies d'un oxyde déposé par HDP (Première ligne du Tableau IV- 4). Dans cette étude, nous avons pu également observer l'effet des paramètres h et e en comparant les valeurs de déformations déduites de la position du pic secondaire. Les valeurs de déformations obtenues sur les cartographies mesurées sont reportées dans le Tableau IV- 4.

e	h	ϵ_{xx}^o	ϵ_{zz}^o
15 nm	410 nm	$-2,2*10^{-3}$	$2*10^{-3}$
10 nm	410 nm	$-1,9*10^{-3}$	$1,94*10^{-3}$
15 nm	250nm	$-1,75*10^{-3}$	$2,03*10^{-3}$

Tableau IV- 4: Comparaison des valeurs de déformations dans la ligne de Silicium pour différentes valeurs de e (épaisseur du liner) et h (hauteur des tranchées)

L'effet de ces paramètres géométriques est peu marqué. Lorsque les tranchées sont moins profondes, cela se traduit par une diminution de la déformation suivant l'axe x d'environ 20% mais pas de changement suivant la profondeur z. Pour ce qui est du liner, la diminution de son

épaisseur de 15nm à 10nm entraîne une légère diminution des déformations suivant les deux directions x et z mais l'effet est plus visible suivant la direction x.

Les valeurs de déformations obtenues avec les variations de h suivent la tendance calculée à l'aide de la modélisation par éléments finis dans le chapitre I. Comme pour l'étude du paramètre b, l'accord entre les simulations et les mesures expérimentales n'est que qualitatif. En observant la Figure IV- 21, on voit que pour h= 250 nm, les déformations ne font que décroître dans la ligne de silicium, spécialement pour les déformations suivant x. La zone de faible variation des déformations n'est presque plus visible alors qu'il n'y a pratiquement pas de différence entre les cartographies mesurées (voir la cartographie 404 en Figure IV- 22 pour h=250 nm, à comparer avec la Figure IV- 14a).

Dans le cadre des simulations par éléments finis, le paramètre h a beaucoup plus d'importance que ce qui est observé expérimentalement.

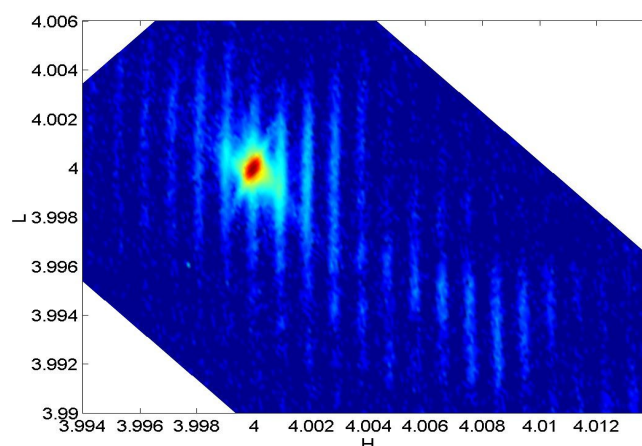


Figure IV- 22: Cartographie 404 du silicium pour un échantillon de hauteur de tranchée 250 nm (au lieu de 410 nm). Mesures avec un monochromateur Dumond-Bartels. p= 580 nm.

5. Variations de procédé

Nous avons regroupé dans ce paragraphe les résultats obtenus avec des variations de procédé. Cela comprend l'étude de l'orientation des lignes de silicium ([100] ou [110]) et l'étude d'une série de 'liners' formés dans des conditions différentes.

5.1 Orientation des lignes

Deux orientations de lignes ont été étudiées: [100], appelé r1, et [110] appelé r2. Les repères associés sont respectivement ([100],[010],[001]) et ([110],[1-10],[001]) et correspondent aux deux orientations possibles des produits. L'orientation du silicium est un paramètre important car il influence la mobilité des porteurs de charges [Sat69, Yan03, Sun05] et nous allons étudier son effet sur les déformations et les contraintes. Les valeurs de déformations ϵ_{xx}^0 et ϵ_{zz}^0 déduites de la position du pic secondaire ainsi que les contraintes calculées avec la loi de Hooke à partir de ϵ_{xx}^0 et ϵ_{zz}^0 sont données dans le Tableau IV- 5.

	ϵ_{xx}^0	ϵ_{zz}^0	σ_{xx}^0 (MPa)	σ_{yy}^0 (MPa)	σ_{zz}^0 (MPa)
lignes [100] (r1)	$-1.68*10^{-3}$	$1.54*10^{-3}$	-182	-9	149
lignes [110] (r2)	$-1.62*10^{-3}$	$1.56*10^{-3}$	-216	42	157

Tableau IV- 5: Comparaison des valeurs de déformations et de contraintes pour les 2 orientations de lignes [100] et [110].

On observe que les déformations sont plus élevées pour r1 suivant x mais elles sont pratiquement identiques suivant z. Pour ce qui est des contraintes, la principale différence est l'apparition d'une contrainte tensile suivant la direction y (le long de la ligne) pour r2. Pour cet échantillon, la compression suivant la direction x est légèrement plus élevée, même si les déformations dans cette direction sont plus faibles.

La modélisation par éléments finis des échantillons est détaillée dans le chapitre I. Les résultats expérimentaux sont comparés aux valeurs des déformations obtenues par simulation (Tableau IV- 6). Il y a un accord partiel entre expérience et simulation mais les simulations prédisent une différence plus importante entre r1 et r2. Pour r2, l'accord entre les valeurs mesurées et simulées est très bon (à $\sim 5*10^{-5}$). Pour r1, les valeurs simulées sont plus élevées. La géométrie des échantillons mesurés par diffraction a été vérifiée au MEB et les lignes de silicium de r1 sont ~ 10 nm plus larges que celles de r2. Ce qui signifie qu'elles mesurent 250 nm pour r1 et 240 nm pour r2. Pourtant r1 et r2 ont été fabriquées sur la même plaquette, cette différence sur la taille des lignes montre donc que le procédé de gravure est influencé par l'orientation du silicium. Lorsque cette variation de 10 nm est introduite dans la simulation par éléments finis, les valeurs de déformations ϵ_{xx}^0 et ϵ_{zz}^0 deviennent $0.1*10^{-3}$ plus petites en valeur absolue ('r1 corrigé' dans le Tableau IV- 6). Par conséquent, les résultats sont également en accord pour r1, à $\sim 5*10^{-5}$, ce qui correspond à la sensibilité de la méthode.

		ϵ_{xx}^0	ϵ_{zz}^0
expérience	r1 – [100] lignes	$-1.68*10^{-3}$	$1.54*10^{-3}$
	r2 – [110] lignes	$-1.62*10^{-3}$	$1.56*10^{-3}$
simulation	r1 – [100] lignes	$-1,8*10^{-3}$	$1,7*10^{-3}$
	r1 – corrigé	$-1,7*10^{-3}$	$1,6*10^{-3}$
	r2 – [110] lignes	$-1,6*10^{-3}$	$1,6*10^{-3}$

Tableau IV- 6: Comparaison des valeurs de déformations mesurées et simulées pour les 2 orientations de lignes [100] et [110]

5.2 Etude comparative de différents 'liners'

Le but de cette comparaison était d'étudier l'effet sur les déformations des conditions de fabrication d'un oxyde thermique d'épaisseur 10 nm pour des échantillons de période 200 nm.

Des échantillons avec 3 'liners' différents ont été mesurés. Le quatrième échantillon a une période de 580 nm contrairement aux autres et provient de l'étude des étapes individuelles (paragraphe 2 de ce chapitre, étape 2). Cet échantillon permet de voir si le 'liner' a le même effet sur les déformations à 200 nm et 580 nm. Les conditions de formation des 'liners' sont décrites ci-dessous :

- liner 1 : formé par ISSG (In Situ Steam Generation) à 900°C dans une atmosphère à 2 % de H₂. C'est une étape d'oxydation rapide ('Rapid Thermal Oxidation' ou RTO) qui dure quelques minutes. p= 200 nm, b= 90 nm et e = 10 nm.

- liner 2 : Oxydation en four en atmosphère sèche à 900°C. La formation du liner dure ici plusieurs heures (montée et descente en température lente). p= 200 nm, b= 90 nm et e= 10 nm.

- liner 3 : Oxydation en four en atmosphère humide à 1050°C. La formation du liner dans ces conditions dure plusieurs heures, tout comme le liner 2. p= 200 nm, b= 90 nm et e=10 nm.

- liner 4 : formé par ISSG à 1050°C dans une atmosphère à 33 % de H₂ (RTO). p= 580 nm, b=240 nm et e=15 nm.

Les cartographies 004 pour les 4 liners sont données en Figure IV- 23. L'échelle est différente pour la figure (4) car la période est plus grande. Les satellites sont donc plus proches et la cartographie est plus resserrée autour du pic du substrat. Les balayages en H=0 suivant la direction L ont été rajoutés en Figure IV- 24 pour permettre une meilleure comparaison. Les cartographies 1, 2 et 3 ont été mesurées avec l'optique hybride et la cartographie 4 avec l'optique Dumond-Bartels.

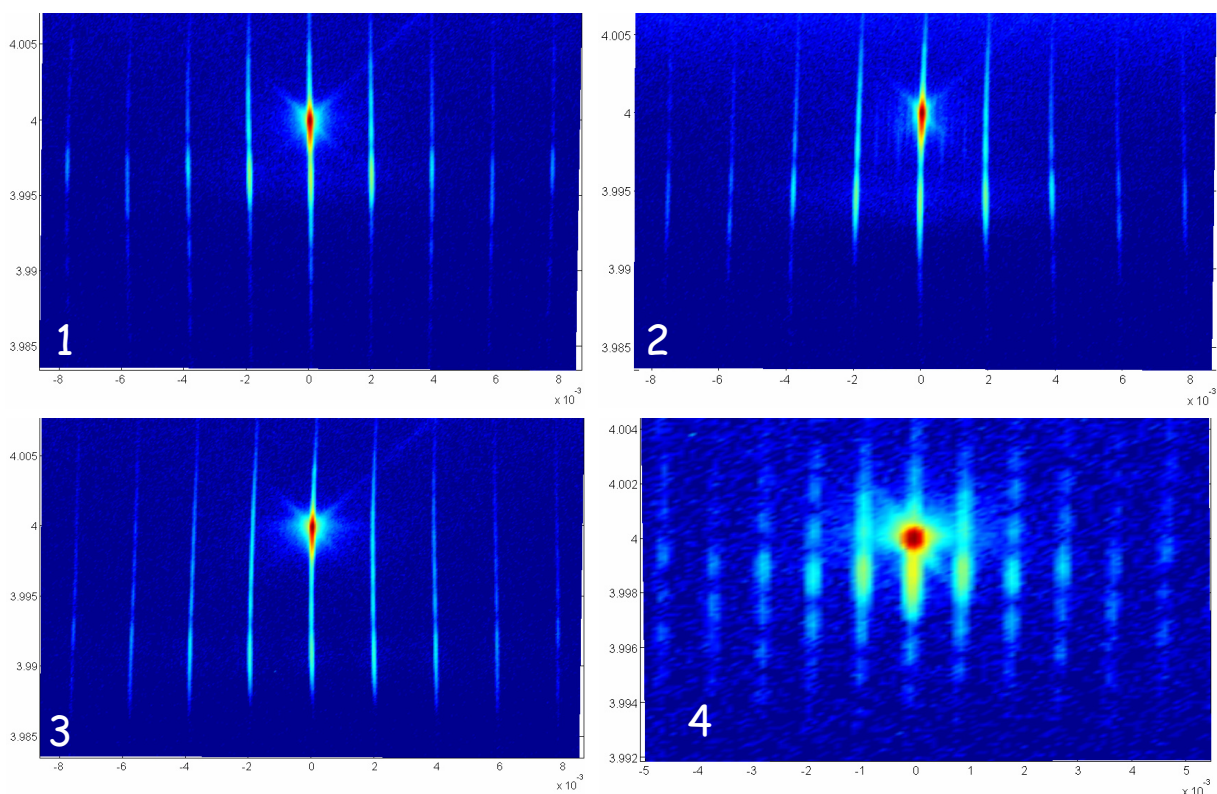


Figure IV- 23: Cartographies 004 pour les 4 liners étudiés : (1) ISSG RTO - 900°C - 2 % de H₂. p= 200 nm, b= 90 nm, e = 10 nm. (2) Oxydation four sèche - 900°C. p= 200 nm, b= 90 nm, e = 10 nm. (3) Oxydation four humide - 1050°C. p= 200 nm, b= 90 nm, e = 10 nm. (4) ISSG RTO - 1050°C - 33 % de H₂. p= 580 nm, b= 240 nm, e = 15 nm.

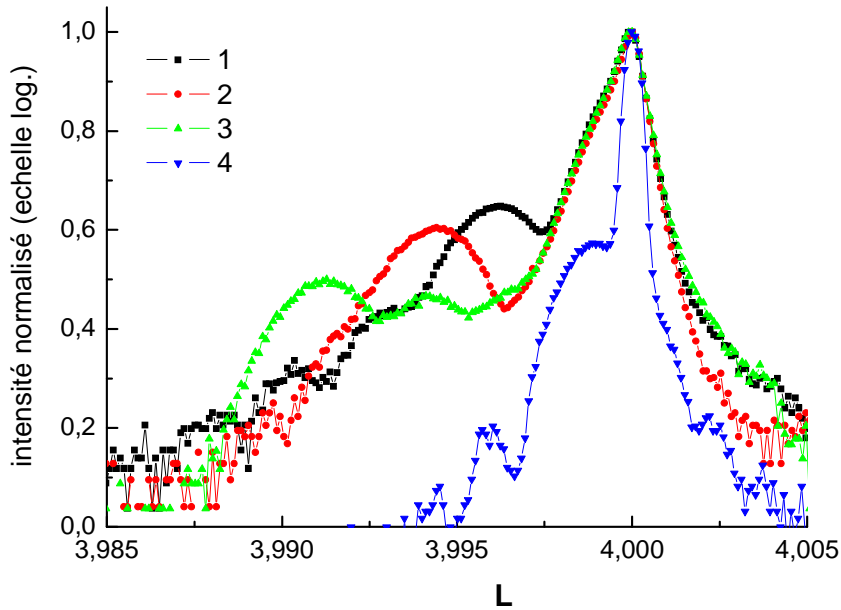


Figure IV- 24: Balayage en H=0 suivant la direction L pour les 4 cartographies 004 de la Figure IV- 23

On voit que les cartographies et les balayages suivant L sont très différents pour tous les 'liners'. Les conditions de fabrication (pour les échantillons 1, 2 et 3) influencent les déformations induites par le liner, même si l'épaisseur de celui-ci n'est que de 10 nm. On remarque sur la Figure IV- 24 que lorsque la période est de 200 nm, on voit apparaître une zone de surintensité décalée par rapport au pic du substrat, comme pour les échantillons dont les tranchées ont été remplies. Ce pic secondaire n'apparaît pas pour l'échantillon 4 de période 580 nm dont l'intensité diminue très vite autour du substrat. On en déduit que la période influence grandement l'effet du liner et amplifie les petites déformations déjà visibles sur les échantillons de périodes plus grandes.

Pour les périodes plus petites, les déformations introduites dans le silicium de chaque côté de la ligne semblent suffisamment fortes pour se superposer au centre de la ligne. On forme ainsi une zone homogène en déformations au centre de la ligne à l'origine du second pic de diffraction, de la même manière que lorsque ces tranchées sont entièrement remplies. Ce pic secondaire est visible sur les cartographies 1, 2 et 3 de la Figure IV- 23 et plus clairement sur les coupes correspondant à ces cartographies sur la Figure IV- 24. Dès lors, nous pouvons facilement comparer ces 3 liners. L'échantillon 1 est le moins déformé $\epsilon_{zz}^0 = 0,94 * 10^{-3}$ d'après la position du pic secondaire, la déformation suivant la direction z dans l'échantillon 2 est de $1,41 * 10^{-3}$ et enfin l'échantillon 3 est le plus déformé avec $\epsilon_{zz}^0 = 2,18 * 10^{-3}$. Le liner ISSG est donc le liner qui induit le moins de déformations pour les échantillons de période 200 nm. Il introduit tout de même plus de déformations qu'un oxyde similaire (liner 4) sur un échantillon de période plus grande, bien que ce dernier soit plus épais ($e=15$ nm) et formé à plus haute température (1050°C pour le liner 4 contre 900°C pour le liner 1). Cela met en évidence l'influence de la période sur les déformations.

6. Mesures sur des structures plus complexes

6.1 Echantillons de période 580 nm (technologie 150 nm)

Nous avons fait plusieurs mesures sur des structures plus complexes que les réseaux de lignes. Pour les échantillons de période 580 nm, deux structures différentes ont été testées. La première (qui sera appelée 'complexe 1') est assez proche des structure-tests classiques, c'est-à-dire d'un réseau parfait puisqu'elle consiste à rajouter une seconde période, perpendiculaire à la première et beaucoup plus grande ($4,9 \mu\text{m}$). On forme ainsi des actives de silicium qui ont la même taille que les mémoires de type embarquées ('embedded') de technologie 150 nm. La Figure IV- 25 montre une vue de dessus de la représentation de cette structure et ses dimensions. Elle est suivie, en Figure IV- 26, par la cartographie 404 obtenue sur cet échantillon 'complexe 1'

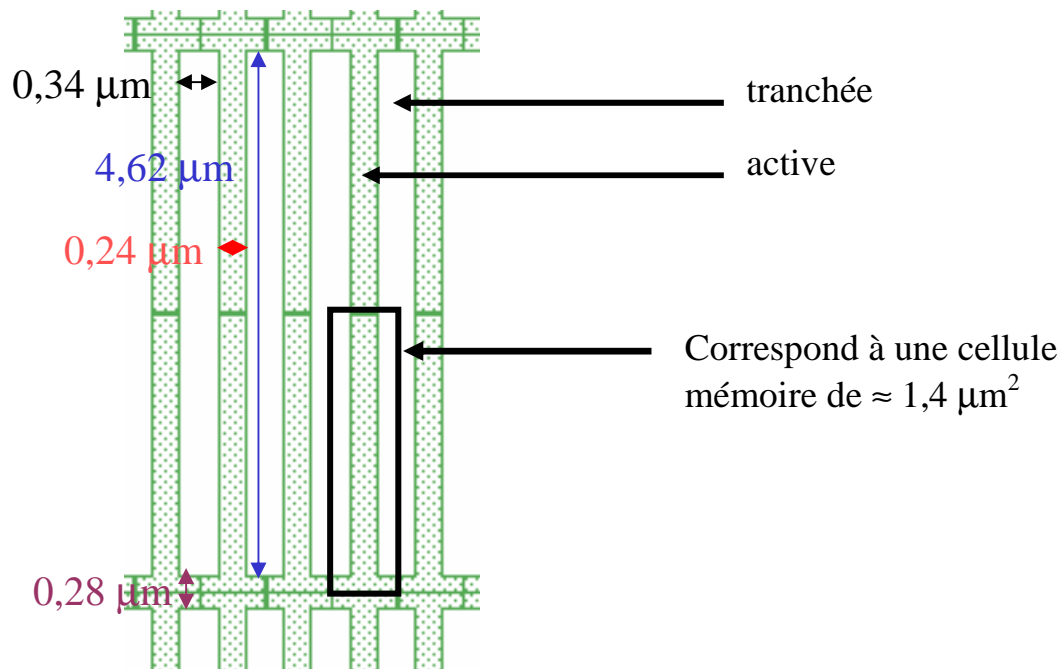


Figure IV- 25: Description de l'échantillon 'complexe 1' en vue du dessus.

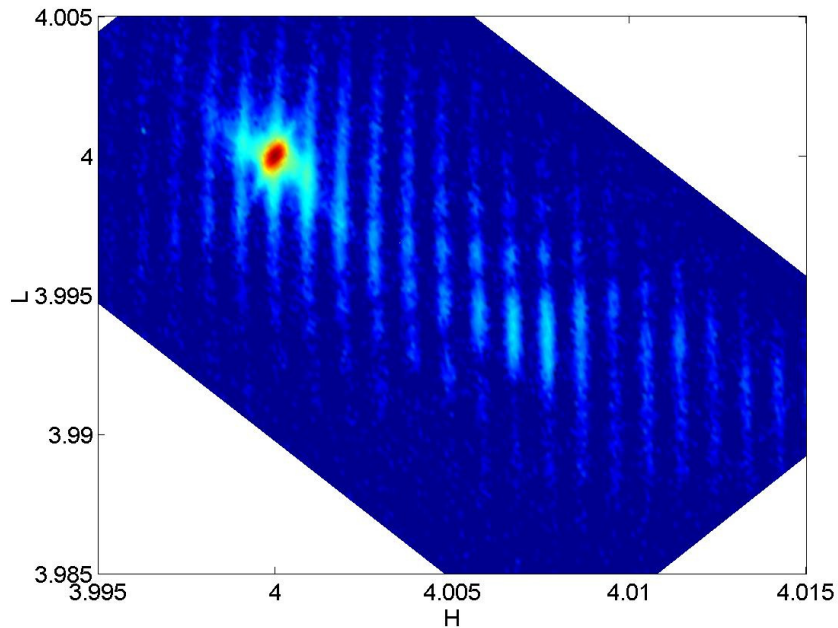


Figure IV- 26: Cartographie 404 du Silicium de l'échantillon 'complexe 1' représenté en Erreur ! Source du renvoi introuvable.. Mesures avec un monochromateur Dumond-Bartels, $\lambda = 580 \text{ nm}$.

On remarque que cette cartographie ressemble beaucoup à la cartographie en Figure IV- 14a (cartographie 404 sur un réseau). La comparaison des valeurs des déformations déduites de ces cartographies est reportée dans le Tableau IV- 7.

La structure 'complexe 2' est identique à la 'complexe 1' au niveau du silicium, l'active a la même forme. Elle est recouverte par d'autres couches déposées sélectivement sur l'active comme le poly-silicium. Les étapes d'implantations ont été également ajoutées afin d'être encore plus proche des produits réels. La Figure IV- 27 montre une vue du dessus de ces structures. Les tailles sont exactement les mêmes que sur l'échantillon 'complexe 1'.

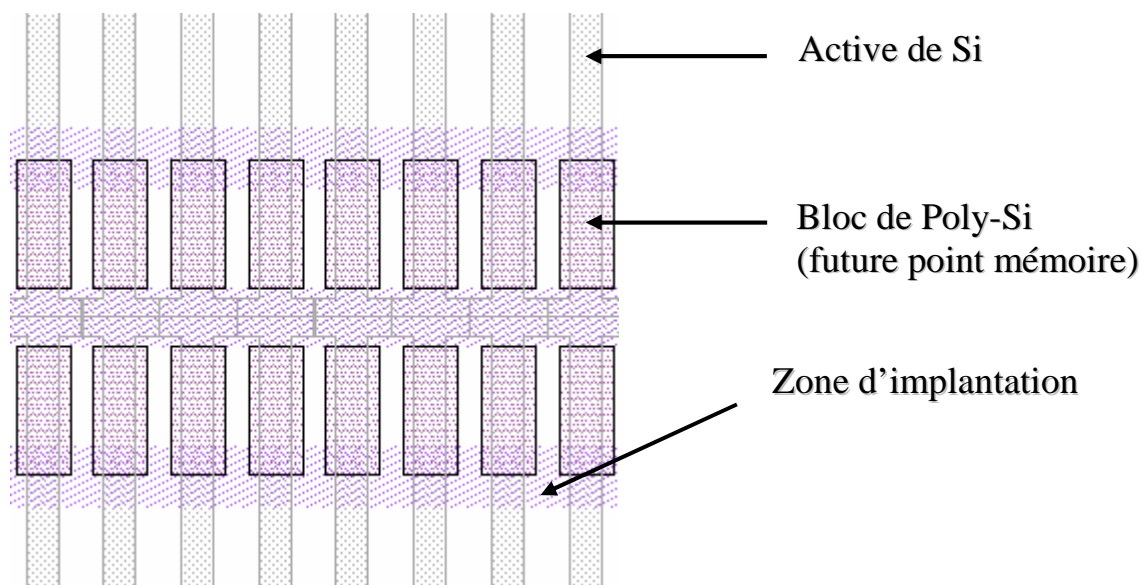


Figure IV- 27: Description de l'échantillon 'complexe 2' en vue de dessus.

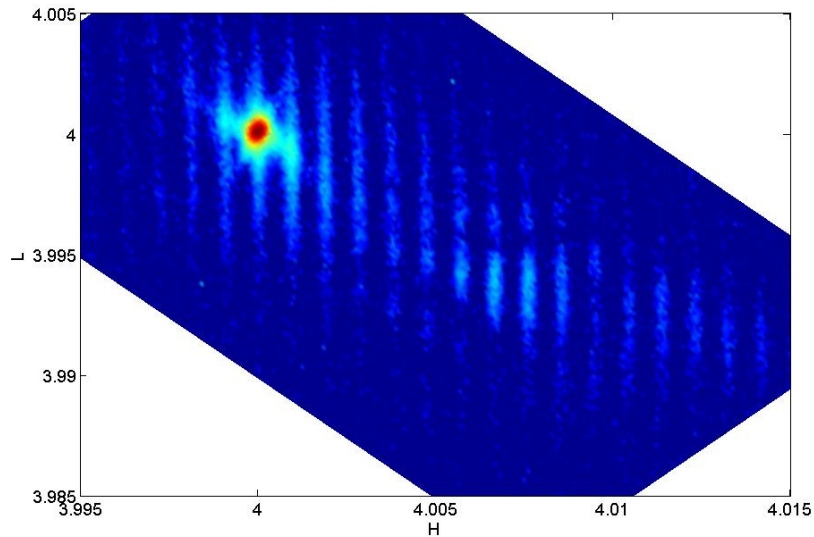


Figure IV- 28: Cartographie 404 du Silicium de l'échantillon 'complexe 2' représenté en Figure IV- 27. Mesures avec un monochromateur Dumond-Bartels. $p= 580$ nm.

Les cartographies obtenues pour les échantillons 'complexe 1' et 'complexe 2' (Figure IV- 28) sont similaires aux cartographies mesurées sur les réseaux parfaits. Les déformations obtenues à partir du pic secondaires sont cependant légèrement différentes. Les valeurs de déformations sont récapitulées dans le Tableau IV- 7.

Echantillon / Déformation	Réseau parfait (standard)	Complexe 1 (2ème période)	Complexe 2 (1+couches +implants)
ϵ_{xx}^0	$-1,68 \cdot 10^{-3}$	$-1,83 \cdot 10^{-3}$	$-1,85 \cdot 10^{-3}$
ϵ_{zz}^0	$1,56 \cdot 10^{-3}$	$1,60 \cdot 10^{-3}$	$1,65 \cdot 10^{-3}$

Tableau IV- 7: Tableau comparatif des déformations mesurées dans un réseau 'parfait' (échantillon standard), l'échantillon 'complexe 1' et l'échantillon 'complexe 2'.

On voit sur le tableau, en comparant l'échantillon standard à l'échantillon 'complexe 1', que la seconde période introduit peu de déformations supplémentaires : ~ 10 % pour ϵ_{xx} et moins de 10 % pour ϵ_{zz} . Il n'y a que très peu de différence entre l'échantillon 'complexe 1' et 'complexe 2', ce dernier est à peine plus déformé. Les différences entre les deux échantillons complexes, à savoir la présence de plot de poly-silicium gravé et de zones d'implantation, n'ont donc presque pas d'effet en terme de déformations.

Les mesures sur les échantillons complexes montrent clairement qu'il est possible de déterminer expérimentalement les déformations moyennes dans les zones actives de silicium dans des échantillons de type produit. En revanche la structure de ces échantillons est trop complexe pour que l'on puisse espérer décrire simplement l'origine des déformations observées. Il est donc important de pouvoir travailler sur des réseaux de lignes pour lesquelles la modélisation 2D par éléments finis reste simple.

6.2 Echantillons de période 200 nm (technologie 90 nm)

Des mesures préalables à ces travaux de thèse ont consisté à mesurer par diffraction X haute résolution un produit contenant de la mémoire de type flash NOR de technologie 130 nm. Ces mesures n'ont pas donné de résultats exploitables. La préparation n'était à ce moment là pas adaptée aux échantillons, le faisceau incident touchait l'ensemble du produit, y compris les parties qui ne contenaient pas de mémoires et donc non périodiques.

Dans le cas d'un produit de technologie 90 nm contenant une grande partie de mémoire Flash NAND, nous avons testé la méthode de mesure. Nous avons fabriqué un masque spécifique à ce produit, c'est-à-dire avec une ouverture pour que le faisceau incident ne fasse diffracter que la zone mémoire du produit. Cela évite d'avoir un signal diffus qui viendra masquer le signal provenant des mémoires.

L'ensemble de l'échantillon mesure 1,8 mm*3.8 mm, ce qui est suffisant pour obtenir assez d'intensité. La structure ressemble à l'échantillon 'complexe 2' décrit dans le paragraphe précédent mais avec des tailles caractéristiques plus petites. Il s'agit d'un réseau de lignes ($p=200$ nm, $b=90$ nm, $h=250$ nm) avec une seconde période, perpendiculaire à la première et beaucoup plus grande ($7,4$ μm suivant la direction y et 200 nm suivant la direction x). A cela s'ajoutent les implants, les couches d'oxyde, de poly-silicium déposées sélectivement sur l'active. Suivant la direction x , l'échantillon est subdivisé en 8 intervalles de 220 μm chacun, correspondant à 1024 actives de silicium. Entre 2 intervalles, la géométrie du silicium est légèrement modifiée mais ce changement de géométrie est suffisamment peu fréquent pour ne pas gêner l'aspect périodique de l'échantillon. La géométrie de ce produit mémoire est donnée en Figure IV- 29 en vue de dessus.

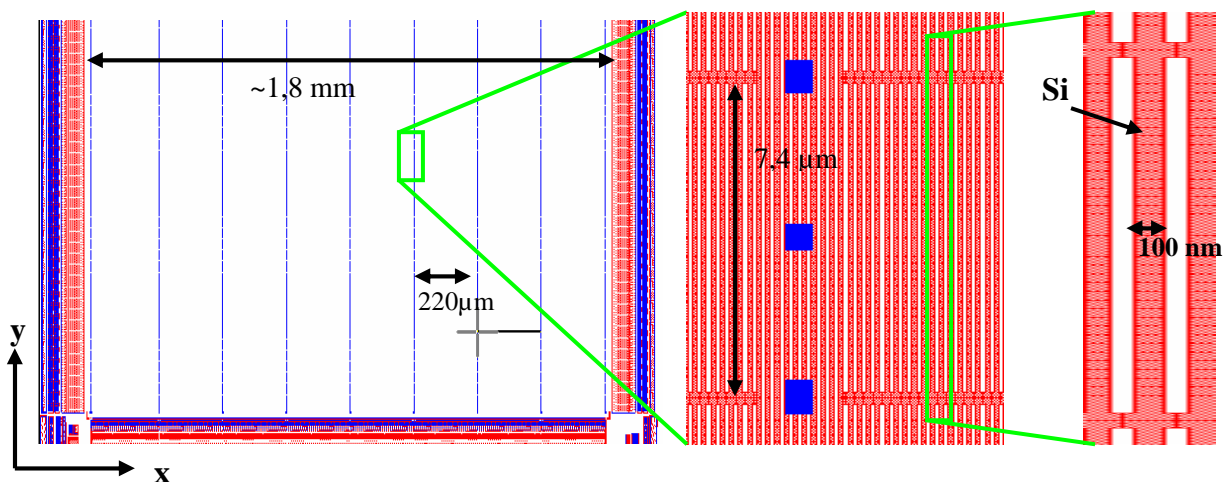


Figure IV- 29: Description de la géométrie du produit mémoire en vue de dessus avec 3 niveaux d'agrandissement.

La Figure IV- 30 montre les cartographies 004 (gauche) et 224 (droite) du produit mémoire en question, mesurées avec l'optique hybride.

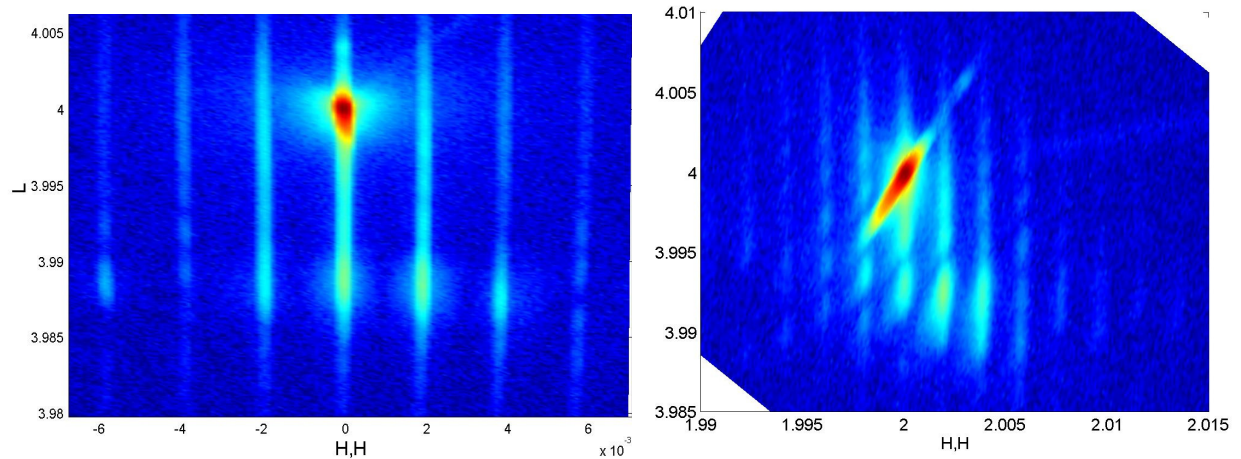


Figure IV- 30: Cartographie 004 (gauche) et 224 (droite) d'un produit de type mémoire Flash NAND de technologie 90 nm.

On voit que les cartographies 004 et 224 du produit mémoire sont semblables aux cartographies sur des réseaux de lignes parfaits de même période. Cette dernière mesure est donc très encourageante puisque les résultats seront exploitables de la même manière que les structure-tests. D'ailleurs la déformation suivant z est très proche du réseau de la même taille. Ici la déformation au centre de la ligne vaut $3 \cdot 10^{-3}$ suivant z contre $2,9 \cdot 10^{-3}$ dans le cas d'un réseau parfait. Enfin, comme il s'agit d'un produit réel, cela signifie aussi que des analyses ponctuelles pourront être faites directement, sans avoir à prévoir initialement sur la plaquette de silicium des structure-tests de grandes dimensions.

Conclusion

L'apparition d'un pic secondaire sur les cartographies de l'espace réciproque réalisées par diffraction de rayons X haute résolution nous a permis d'accéder à une mesure directe des valeurs de déformation moyenne dans les lignes de Si avec une sensibilité sur les déformations de $\sim 5 \cdot 10^{-5}$. Dans ce chapitre, nous avons utilisé cette méthode de mesure directe des déformations pour étudier l'influence sur les contraintes des paramètres de fabrications des procédés STI réalisés à ATMEL.

Nous avons étudié les deux procédés de fabrication des tranchées STI : le procédé STI dit standard (STI Std) et le Self Aligned STI (SA-STI). Le but de cette étude était de savoir quelle technologie introduisait le moins de contraintes dans le silicium. Nous avons montré que le procédé STI-Std introduit ~ 55 % de déformations supplémentaires par rapport au procédé SA-STI. Les contraintes sont également plus élevées dans le procédé STI-Std et on voit apparaître des contraintes en compression le long des lignes qui ne sont visibles pour aucun autre échantillon. Les mesures sur l'échantillon STI-Std_{inter} (procédé STI-Std après gravure) nous a permis d'apprendre que les étapes telles que la formation de l'oxyde tunnel, les implantations et les recuits sont globalement beaucoup plus néfastes lorsqu'elles sont réalisées sur des lignes de silicium déjà gravées plutôt que sur du silicium pleine plaque.

Nous avons mené une étude de l'influence des étapes individuelles du procédé SA-STI sur l'évolution des contraintes pour des échantillons de période 580 nm. Il apparaît que l'essentiel des déformations sont introduites lors du remplissage des tranchées par dépôt HDP. Il a été également intéressant de voir que la technique de mesure est suffisamment sensible pour observer les déformations induites par les couches déposées sur les lignes de silicium avant la gravure. Nous avons complété ces résultats par une étude des paramètres géométriques tel que l'épaisseur du 'liner' (e), la largeur des lignes (b) et la hauteur des tranchées (h). Le paramètre (e) a une influence presque négligeable alors que les déformations diminuent lorsque (h) diminue et lorsque (b) augmente. Ce phénomène avait été également observé à l'aide de la modélisation par éléments finis (chapitre I). Cependant l'accord entre les simulations et les mesures expérimentales reste qualitatif.

Deux types de remplissage TEOS/O₃ ont été ensuite testés pour remplacer le remplissage HDP. Selon les conditions de dépôt, le signe des déformations peut être inversé. Lorsque l'oxyde est recuit après dépôt, les contraintes sont sensiblement les mêmes que pour l'oxyde HDP et les déformations sont plus élevées suivant x et plus faibles suivant z. Lorsque le remplissage est de type HARP (dépôt en 2 étapes), le silicium dans les lignes est déformé négativement suivant la direction z et positivement suivant la direction x, donc opposé à ce qui est habituellement observé.

Nous avons également étudié l'influence de l'orientation des lignes de silicium sur les déformations pour des échantillons de période 580 nm. L'écart entre des lignes orientées [100] et [110] est faible mais tout de même mesurable et en accord avec l'étude réalisée par éléments finis dans le chapitre I. Le dernier paramètre auquel nous nous sommes intéressés est la condition de fabrication du liner pour des échantillons représentatifs de la technologie 90 nm (p=200 nm). Cette étape s'est montrée plus critique avec la diminution de la période. Selon les conditions de dépôts, les déformations au centre des lignes de silicium varient de $\epsilon_{zz}^0 = 0,94 \cdot 10^{-3}$ pour un oxyde ISSG RTO à 900°C à $\epsilon_{zz}^0 = 2,18 \cdot 10^{-3}$ pour un oxyde réalisé en

four en atmosphère humide à 1050°C. A nouveau la technique s'est montrée très sensible aux déformations induites par une couche d'à peine 10 nm d'épaisseur.

Le Tableau IV- 8 rassemble les effets des paramètres étudiés dans ce chapitre. Pour chaque catégorie, il s'agit d'une comparaison qualitative et seules les différences supérieures à $2 \cdot 10^{-4}$ en déformations sont mentionnées.

Paramètres		ϵ_{xx}	ϵ_{zz}	σ_{rss}	
Fabrication STI (p=580 nm)	STI-Std	+++	---	+++	
	SA-STI	++	--	++	
Remplissage des STI	Période : 580 nm	HDP	++	--	++
		TEOS/O ₃	+++	-	++
	Période : 200 nm	HDP	+++	---	+++
		HARP	--	++	++
		W	Non mesuré	+	
Variations géométriques/ procédé (p=580 nm)	Standard	++	--	++	
	b ↗	+	-	+	
	h ↘	+	--	++	
	e ↗	++	--	++	
	[100] / [110]	++	--	++	
Fabrication 'liner' (p=200 nm)	ISSG RTO 900°C	Non mesuré	-		
	Oxydation sèche 900°C	Non mesuré	--		
	Oxydation humide 1050°C	Non mesuré	---		

Tableau IV- 8: Effet qualitatif sur les déformations et la contrainte résolue des différents paramètres étudiés dans le chapitre.

Enfin des mesures ont pu être réalisées sur des échantillons de période 580 nm plus complexes que les réseaux parfaits. La présence d'une seconde période, perpendiculaire à la première et très grande (supérieure à quelques μm) ainsi que la présence de plots de polysilicium et de zone d'implantation n'a pas posé de problème pour la mesure. La technique de mesure habituelle a même pu être employée directement sur un produit mémoire réel issu de la technologie 90 nm. Ce résultat est très prometteur puisque qu'il permet de faire des mesures de déformations sans avoir à fabriquer des structure-tests spécifiques.

Références :

- [Arg04] R. Arghavani, Z. Yuan, N. Ingle, K-B Jung, M. Seamons, S. Venkataraman, V. Banthia, K. Lilja, P. Leon, G. Karunasiri, S. Yoon, and A. Mascarenhas, IEEE 51(10), 1740 (2004)
- [Arm01] A. Armigliato, R. Balboni, S. Frabboni, A. Benedetti, A.G. Cullis, G.P. Carnevale, P. Colpani, G. Pavia, Mat. Sc. Semic. Proc. 4, 97 (2001)
- [Bry94] A. Bryant, W. Hansch, T. Mii, Tech. Dig. Int. Electron Devices Meet., 671 (1994)
- [Dom99] K.F. Dombrowski, A. Fischer, B. Dietrich, I. De Wolf, H. Bender, S. Pochet, V. Simons, R. Rooyackers, G. Badenes, C. Stuer, J. Van Landuyt, IEDM, 357 (1999)
- [Gai93] M. Gailhanou, T. Baumbach, U. Marti, P.C. Marti, , F.K. Reinhart, M. Llegems, Appl. Phys. Lett. 62 (14), 1623 (1993).
- [Hen] http://henke.lbl.gov/optical_constants/
- [Ish97] K. Ishimaru, F. matsuoka, M. Takahashi, Symp. VLSI Technol., 123 (1997)
- [Kim98] T.K. Kim, D.H. Kim, J.K. Park, IEDM Tech. Dig., 145 (1998)
- [Liu04] R. Liu, M. Canonico, Microelec. Eng. 75, 243 (2004)
- [Lou06] A. Loubens, 'Champ de déformation induit dans un monocristal par un réseau de dimension submicroniques : diffraction des rayons X en mode haute résolution et simulation par éléments finis', Thèse de l'Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne et de l'Université Jean Monnet de Saint-Etienne (2006).
- [Par97] M.H. Park, S.H. Hong, S.J. Hong, IEDM Tech. Dig., 669 (1997)
- [Sai98] K. Saino, K. Okonogi, S. Horiba, IEDM Tech. Dig. 149 (1998)
- [Sat69] T. Sato, et al., Jpn. J. Appl. Phys. **8**, p.588 (1969).
- [Stu01] C. Stuer, J. Van Landuyt, H. Bender, I. De Wolf, R. Rooyackers, G. Badenes, Journal of Electrochem. Soc. 148(11), G597 (2001)
- [Sug06] R. Sugie, K. Matsuda, T. Ajioka, M. Yoshikawa, T. Mizukoshi, K. Shibusawa, S. Yo, J. Appl. Phys. 100, 064504 (2006)
- [Sun05] C.-H. Sung et al., IEEE (2005)
- [Til06] A.T. Tilke, C. Stapelmann, M. Culmsee, R. Conti, W. Wille, R. Jaiswal, M. Gailiano, A. Jain, 'STI Gap-Fill Technology with High Aspect Ratio Process for 45nm CMOS and beyond', ASMC 2006
- [Yan03] M. Yang et al., "High performance CMOS fabricated on hybrid substrate with different crystal orientations, " in IEDM Tech. Dig., 453 (2003)

Conclusions générales et perspectives

La détermination expérimentale des contraintes et des déformations à l'échelle des produits actuellement en développement ou en production dans la microélectronique est un enjeu de taille. Durant ce travail de thèse nous avons développé la technique de mesure des déformations locales par diffraction X haute résolution dans le cas d'échantillons représentatifs des mémoires de type EEPROM (Electrically Erasable and Programmable Read Only Memory) et Flash pour les technologies 150 nm et 90 nm. Les mesures par diffraction X ont été complétées par des simulations par la méthode des éléments finis à l'aide du logiciel Femlab et des calculs de cartographies de l'espace réciproque afin de valider les simulations.

Ce travail a permis d'obtenir un certain nombre de résultats importants :

Le plus important est l'étude de l'influence de la période des échantillons. Il a été montré que pour les échantillons de période inférieure au μm , il y avait apparition d'un pic secondaire sur les cartographies de l'espace réciproque. Les profils de déformations simulés par éléments finis ont permis de conclure sur l'origine de ce pic. Il provient du silicium au centre de la ligne, qui est déformé de manière homogène. Cette partie de la ligne diffracte donc comme s'il s'agissait d'un autre cristal avec un paramètre de maille légèrement différent de celui du silicium. Cette particularité des échantillons submicroniques nous a donc permis de mesurer directement et sans modèle les déformations dans ces échantillons. Cette technique a été ensuite utilisée pour comparer deux procédés de fabrication des tranchées et étudier l'effet des paramètres géométriques et des conditions de fabrication des lignes de silicium sur les déformations locales.

La modélisation par éléments finis nous a permis d'apprendre qu'il y a un rapport d'environ 1,5 entre la contrainte résolue au centre de la ligne et dans les coins supérieurs (là où elle est maximale). Celle-ci varie linéairement avec la variation de température appliquée à la structure et également en fonction de la largeur de lignes (entre 140 nm et 340 nm). La diminution de période p , quant à elle, entraîne une augmentation de la contrainte résolue. Cependant, la contrainte tend aussi à s'homogénéiser avec la diminution de p car la valeur au centre semble tendre vers une valeur limite, ce qui est en accord avec le modèle composite développé dans le premier chapitre. D'autre part, la différence entre la contrainte résolue au centre et la valeur maximale diminue avec cette homogénéisation.

Deux procédés de fabrication des tranchées ont été comparés, le SA-STI (Self Aligned) et le STI-Std (Standard). Dans le procédé STI-Std, la définition des actives de silicium est faite en premier. L'oxyde de grille ainsi que d'autres étapes sont donc fabriquées sur des structures déjà gravées. Dans le SA-STI, l'oxyde de grille est formé avant la gravure. Le poly-silicium est gravé en même temps que le silicium, il est donc aligné avec le silicium. On a ainsi pu montrer que le procédé STI-Std introduit ~55 % de déformations supplémentaires par rapport au procédé SA-STI. Les contraintes sont également plus élevées dans le procédé STI-Std. Les mesures sur l'échantillon STI-Std_{inter} (procédé STI-Std après gravure) nous a permis d'apprendre que les étapes telles que la formation de l'oxyde tunnel, les implantations et les recuits sont globalement beaucoup plus néfastes lorsqu'elles sont réalisées sur des lignes de silicium déjà gravées plutôt que sur du silicium en pleine plaque.

Il apparaît que pour le procédé SA-STI, les déformations sont introduites principalement lors du remplissage des tranchées par dépôt HDP (High Density Plasma). C'est pourquoi d'autres types de remplissage ont été testés. Selon les conditions de dépôt du

TEOS/O₃, le signe des déformations peut être inversé. Lorsque l'oxyde est recuit après dépôt, la contrainte résolue est sensiblement la même que pour l'oxyde HDP et les déformations sont plus élevées suivant x (perpendiculairement aux lignes dans le plan de la surface) et plus faibles suivant z (perpendiculairement à la surface). Lorsque le remplissage est de type HARP (dépôt en 2 étapes), le silicium dans les lignes est déformé négativement suivant la direction z et positivement suivant la direction x, donc de manière opposée à ce qui est habituellement observé.

Nous avons également étudié l'influence de l'orientation des lignes de silicium sur les déformations pour des échantillons de période 580 nm. L'écart de déformations entre des lignes orientées [100] et [110] est faible mais tout de même mesurable et en accord avec l'étude réalisée par éléments finis. Nous avons complété ces résultats par une étude des paramètres géométriques tels que l'épaisseur du 'liner' (e), la largeur des lignes (b) et la hauteur des tranchées (h). Le paramètre (e) a une influence presque négligeable alors que les déformations diminuent lorsque (h) diminue et lorsque (b) augmente. Ce phénomène avait été également observé à l'aide de la modélisation (chapitre I). Cependant l'accord entre les simulations et les mesures expérimentales reste qualitatif.

Un programme de comparaison automatique par l'intermédiaire d'une fonction d'erreur de type χ^2 a été développé et mis en œuvre pour ajuster les cartographies simulées sur les mesures expérimentales. Le bon accord entre l'intensité mesurée et simulée sur les satellites proches du pic secondaire a validé le modèle mécanique sur la zone homogène en déformation sur des lignes de moins de 100 nm de large dans le cas des échantillons de période 200 nm. En revanche, le désaccord sur les satellites plus éloignés du pic secondaire signifie que les déformations calculées doivent être modifiées près des interfaces. Ces différences sont attribuées au modèle mécanique utilisé. Sa facilité d'utilisation est en effet un avantage mais la complexité des échantillons nous empêche de valider l'ensemble du champ de déformation simulé. Certaines étapes du procédé comme la diffusion ou les oxydations thermiques ne peuvent être simulées avec précision par le logiciel Femlab. Ce désaccord simulation/mesure montre à quel point la diffraction X haute résolution est sensible aux détails du champ de déformation, notamment aux bords des lignes d'actives.

La technique s'est aussi montrée très sensible aux déformations induites par une couche d'oxyde thermique d'à peine 10 nm d'épaisseur sur des échantillons représentatifs de la technologie 90 nm. Cette étape s'est montrée particulièrement critique avec la diminution de la période de 580 nm à 200 nm et des différences en fonction des conditions de fabrication ont été observées.

Enfin des mesures ont pu être réalisées sur des échantillons de période 580 nm plus complexes que les réseaux parfaits. La présence d'une seconde période, perpendiculaire à la première et très grande (supérieure à quelques μm) ainsi que la présence de plots de polysilicium et de zones d'implantation n'a pas posé de problème pour la mesure. La technique de mesure habituelle a même pu être employée directement sur un produit mémoire réel issu de la technologie 90 nm. Ce résultat est très prometteur puisque qu'il permet de faire des mesures de déformations sans avoir à fabriquer des structures tests spécifiques.

Ces travaux ouvrent plusieurs perspectives. D'un point de vue expérimental, la technique de mesure a été validée pour des échantillons de période allant de 2 μm à 200 nm et des mesures ont même pu être réalisées sur des produits mémoires réels issus de la technologie 90 nm. Cependant, nous n'avons pas validé l'ensemble du champ de déformations. Celui-ci est connu au centre des lignes de silicium mais n'est pas bien modélisé près des interfaces. Deux approches différentes permettraient l'accès au champ de déformation total :

1) L'amélioration du modèle mécanique par l'utilisation d'un programme capable de simuler l'ensemble des étapes du procédé (tel que ISE[®] ou IMPACT[®]) devrait permettre d'obtenir un champ de déplacement plus proche de la réalité.

2) Une autre approche actuellement en plein essor, consiste à retrouver le champ de déformation directement à partir des clichés de diffraction. Il s'agit de la méthode d'inversion dont le but est de retrouver la phase du signal (qui contient l'information sur les déplacements). Pour des clichés dont l'ensemble de l'enveloppe du signal est connue avec précision, la technique a déjà montré son efficacité [Min07]. Cependant lorsque l'enveloppe du signal est échantillonnée par la périodicité de l'échantillon, comme c'était le cas dans ces travaux, le manque d'information sur l'enveloppe complique l'exploitation des résultats. A l'aide de cartographies suffisamment grandes et mesurées pour plusieurs réflexions, l'interpolation du signal entre les satellites devrait permettre de calculer l'ensemble de l'enveloppe, et ainsi de retrouver les déformations dans l'ensemble de l'échantillon indépendamment de tout modèle mécanique.

[Min07] A.A Minkevich, M. Gailhanou, J.-S. Micha, B. Charlet, V. Chamard, O. Thomas, Phys. Rev. B 76 (10), 104106 (2007)

Publications et communications

1. PUBLICATIONS

Eberlein M., Escoubas S., Gailhanou M., Thomas O., Rohr P., Coppard R
'Diffraction from periodic arrays of oxide-filled trenches in silicon: investigation of local strain'
Materials Research Society Symposium Proceedings vol. 913, D05-02 (2006).

Eberlein M., Escoubas S., Gailhanou M., Thomas O., Rohr P., Coppard R
'Investigation by High Resolution X-Ray Diffraction of the local strains induced in Si by periodic arrays of oxide filled trenches'
Phys. Stat. Sol.(a) 204(8), 2542 (2007)

Eberlein M., Escoubas S., Gailhanou M., Thomas O., Rohr P., Coppard R
'Influence of crystallographic orientation on local strains in silicon: a combined High-Resolution X-Ray Diffraction and Finite Element Modeling investigation'
Invited paper, To be published in 'Thin Solid Films'

2. COMMUNICATIONS INTERNATIONALES

Eberlein M., Escoubas S., Thomas O., Rohr P., Coppard R. (poster)
Diffraction of local stress created by periodic trench isolation structure.
International Workshop on Phase Retrieval and Coherent Scattering,
Porquerolles, France, 15 - 17 juin 2005.

Eberlein M., Escoubas S., Gailhanou M., Thomas O., Rohr P., Coppard R. (présentation orale, avec actes)
Diffraction from periodic arrays of oxide-filled trenches in silicon: investigation of local strain.
Materials Research Society Spring Meeting,
San Francisco, USA, 17-21 avril 2006.

Eberlein M., Escoubas S., Gailhanou M., Thomas O., Micha J.S., Rohr P., Coppard R.
(poster, avec actes)
Investigation by High Resolution X-Ray Diffraction of the local strains induced in Si by periodic arrays of oxide filled trenches.
8th Biennial Conference on High Resolution X-Ray Diffraction and Imaging (XTOP 2006),
Karlsruhe/Baden-Baden, Germany, 19-22 septembre 2006.

Eberlein M., Escoubas S., Gailhanou M., Thomas O., Rohr P., Coppard R. (poster)
Atelier Contraintes Mécaniques Locales et Microdiffraction. Workshop User BM 32.
Grenoble, France, 28-29 Septembre 2006

Eberlein M., Escoubas S., Gailhanou M., Thomas O., Rohr P., Coppard R. (présentation orale 'invité', avec actes)
European Materials Research Society Fall Meeting 2007 (E-MRS 2007),
Influence of crystallographic orientation on local strains in silicon: a combined High-Resolution X-Ray Diffraction and Finite Element Modeling investigation
Varsovie, Pologne, 17-21 Septembre 2007

3. COMMUNICATIONS NATIONALES

Eberlein M., Escoubas S., Thomas O., Rohr P., Coppard R. (poster)
Mesure de contraintes locales par diffraction X Haute-Résolution sur des structures STI périodiques.
Ecole thématique CNRS contraintes internes : de leurs origines à leur utilisation dans les matériaux à propriétés électroniques,
Nant, France, 18 - 23 septembre 2005.

Eberlein M., Escoubas S., Thomas O., Rohr P., Coppard R. (présentation orale)
Diffraction from periodic arrays of oxide-filled trenches in silicon: investigation of local strains.
8èmes Rencontres Scientifiques et Techniques du CREMSI,
Gardanne, France, 20 - 21 octobre 2005.

Eberlein M., Escoubas S., Thomas O., Rohr P., Coppard R. (présentation orale, avec actes)
Influence des paramètres de fabrication sur les contraintes dans le silicium.
9ème édition des Journées Nationales du Réseau Doctoral en Microélectronique,
Rennes, France, 10-12 Mai 2006.

Eberlein M., Escoubas S., Thomas O., Rohr P., Coppard R. (poster)
Détermination de contraintes locales par Diffraction X Haute-Résolution (HR-XRD) sur des structures STI périodiques.
10ème Journées de la Matière Condensée (JMC 10),
Toulouse, France, 28 août-1 septembre 2006.

Eberlein M., Escoubas S., Gailhanou M., Thomas O., Rohr P., Coppard R. (poster)
User meeting, synchrotron SOLEIL
St Aubin, France, 17-18 Janvier 2007

Eberlein M., Escoubas S., Gailhanou M., Thomas O., Rohr P., Coppard R. (poster, avec actes)
10ème édition des Journées Nationales du Réseau Doctoral en Microélectronique
JNRDM 2007
Lille, France, 14-16 Mai 2007 : JNRDM 07

Eberlein M., Escoubas S., Gailhanou M., Thomas O., Rohr P., Coppard R. (présentation orale)
Journées Annuelles de la SF2M (Société Française de Métallurgie et de Matériaux) – JA 2007
St Etienne, France, 30 Mai-1 Juin 2007

ANNEXE 1 :

Mesures de courbures

1.1 Principe de la mesure de courbure :

Les contraintes intrinsèques qui se développent lors d'un dépôt sont caractéristiques du type de matériau déposé et des conditions de dépôt. Elles se mesurent sur des couches minces déposées sur une « pleine plaque » de substrat épais (ici du silicium de 750 μm). La contrainte intrinsèque est alors calculée à partir de la mesure du rayon de courbure de cette plaque.

En effet, lorsque l'épaisseur de la couche déposée est très faible comparé à l'échelle du substrat, on peut appliquer la formule de Stoney [Sto09] :

$$\sigma_0 = \frac{E}{1-\nu} \times \frac{h^2}{6.R.t}$$

Où,

σ_0 = contrainte dans le film déposé

E = module de Young du substrat

ν = coefficient de Poisson du substrat

h = épaisseur du substrat

t = épaisseur de la couche déposée

R = rayon de courbure du substrat

Dans cette formule la courbure ne dépend pas de la nature de la couche déposée mais uniquement de son épaisseur. Elle permet donc de calculer directement la contrainte intrinsèque dans la couche à partir du rayon de courbure du substrat.

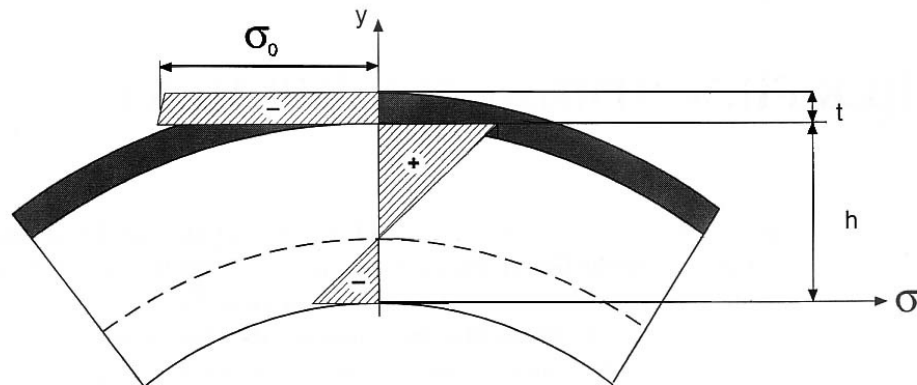


Figure 1 : Evolution de la contrainte dans le substrat (σ) et dans la couche mince (σ_0)

1.2 Montage

Le rayon de courbure du substrat R est mesuré par déflexion laser sur un appareil KLA-TENCOR Flexus. On effectue un balayage de l'échantillon avec le faisceau laser grâce à un miroir dont la position est contrôlée numériquement. La courbure de l'échantillon entraîne un déplacement du faisceau laser défléchi qui permet de calculer R et donc la contrainte sur l'ensemble du substrat avec une grande précision.

1.3 Echantillons :

Cette étude a servi à obtenir la contrainte intrinsèque de différents oxydes de remplissage avant et après densification par recuit à haute température. Les mesures de rayon de courbure sont effectuées à la température ambiante suivant 4 diamètres pour vérifier l'isotropie du dépôt. Une première mesure de courbure a été réalisée après le dépôt de 6000 Å d'oxyde et une seconde après densification de l'oxyde (voir Tableau 1).

Les 3 oxydes de remplissage mesurés sont déposés :

- par HDP avec de l'Argon à 750°C ou 380°C
- par HDP avec de l'Helium à 700°C

Les 4 recuits de densification étudiés qui suivent ces dépôts d'oxyde sont à :

- 850°C sous atmosphère oxydante ou non-oxydante
- 750°C sous atmosphère non-oxydante
- 1050°C sous atmosphère non-oxydante

Après ces mesures de courbure, toutes les plaques subissent une gravure à condition identique de l'oxyde. L'épaisseur restante d'oxyde est mesurée par ellipsométrie pour connaître la quantité d'oxyde que l'on a gravée. L'épaisseur d'oxyde gravée permet d'avoir une indication sur la densité de l'oxyde car plus un oxyde est dense, plus sa gravure est lente.

1.4 Résultats :

Dépôt HDP	Contrainte après dépôt (MPa)	Densification	Δcontrainte après densification	Épaisseur gravée (Å)
Argon ~750°	-196	850° O ₂	-4,2	1710
	-199	850° N ₂	-5,1	1690
	-199	1050° N ₂	-99	1440
	-201	750° N ₂	26	1740
Argon~380°	-98	850° O ₂	-27	2020
	-96	850° N ₂	-29	2010
	-95	1050° N ₂	-167	1520
	-97	750° N ₂	35	2270
Helium ~600°	-239	850° O ₂	-3,5	1640
	-239	850° N ₂	-7,5	1620
	-240	1050° N ₂	-75	1410
	-238	750° N ₂	21	1670

Tableau 1 : Résultats des mesures de courbures (pour 3 dépôts et 4 recuits) et épaisseur d'oxyde gravée.

1.5 Interprétation :

- Pour des oxydes déposés avec le même gaz, plus la température de dépôt est faible, plus l'oxyde est sensible au recuit (voir Figure 2 - différence entre Ar à 380°C et 750°C).
- Les oxydes déposés avec l'hélium sont moins sensibles au recuit que ceux déposés avec de l'argon. Lorsque la température de recuit augmente, la contrainte dans le film devient plus compressive (Figure 2).
- Il semblerait que l'atmosphère du recuit n'ait par contre que peu d'influence sur la contrainte (recuit à 850°C).
- La Figure 3 montre que la vitesse de gravure de l'oxyde est lié l'état de contrainte de la couche.
- Plus l'oxyde est dense (vitesse de gravure lente), plus l'oxyde est en compression

De manière générale, lorsque la température de recuit est élevée, l'oxyde se densifie et est mis en compression (contrainte négative). Pour des températures plus faibles (750°C), la contrainte dans l'oxyde diminue. L'état de contrainte après dépôt détermine la sensibilité au recuit.

On remarque aussi que le gaz utilisé pour le dépôt de l'oxyde à une influence sur les contraintes. Les oxydes déposés avec de l'hélium à 600°C sont plus compressifs que ceux

déposés avec de l'Argon. Etant plus compressifs et denses, ils sont moins sensibles à la densification.

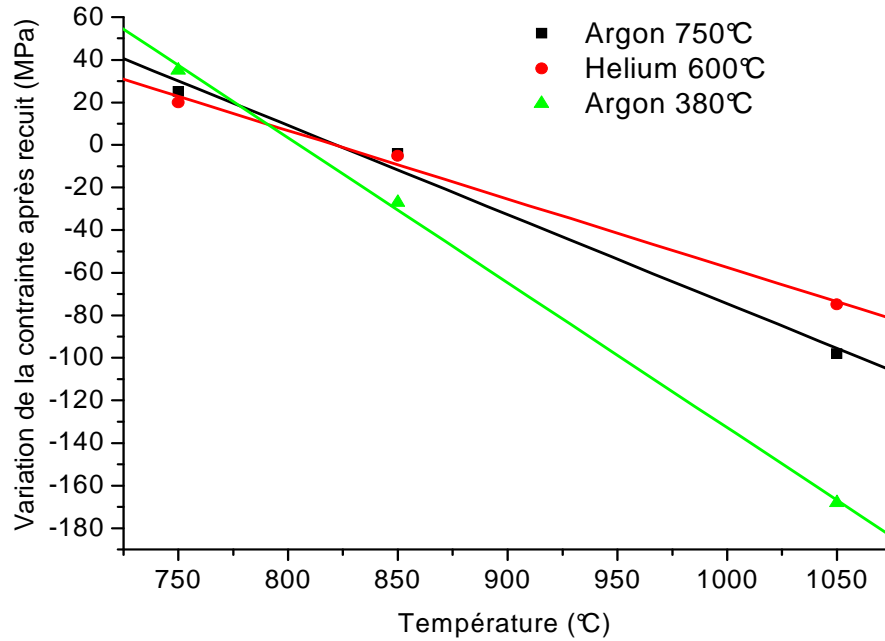


Figure 2: Effet de la température de densification sur la variation de contrainte dans la couche d'oxyde.

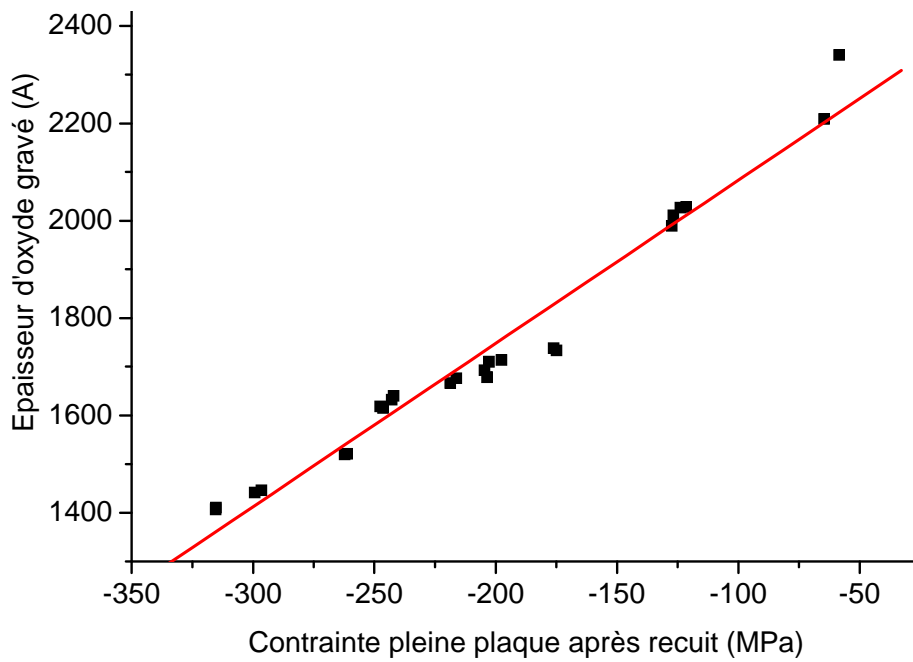


Figure 3 : Variation de l'épaisseur d'oxyde gravée en fonction de la contrainte dans la couche d'oxyde.

References :

[Sto09] G. G. Stoney, Proc. R. Soc. London Ser. A82, 172 (1909)

ANNEXE 2 :

Calcul et valeurs de la contrainte résolue pour les 12 systèmes $[\vec{b} + \text{plan de glissement}]$ du silicium dans les repères $([100],[010],[001])$ et $([\bar{1}\bar{1}0],[110],[001])$

Contrainte résolue dans le repère $([100],[010],[001])$:

Dans un premier, le repère considéré est le repère cristallographique, $\frac{\vec{b}}{b}$ a été pris égale à $\frac{[\bar{1}\bar{1}0]}{\sqrt{2}}$ et \vec{n} égale à $\frac{[111]}{\sqrt{3}}$. On a donc l'expression suivante :

$$\frac{\vec{b}}{b} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} = \begin{pmatrix} -\sigma_{xx}/\sqrt{2} \\ \sigma_{yy}/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_{RSS} = \begin{pmatrix} -\sigma_{xx}/\sqrt{2} \\ \sigma_{yy}/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \vec{n} = \begin{pmatrix} -\sigma_{xx}/\sqrt{2} \\ \sigma_{yy}/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} = \frac{-\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{\sqrt{6}}$$

$$\bar{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

Les quatre valeurs de \vec{n} sont $\frac{[111]}{\sqrt{3}}$, $\frac{[\bar{1}\bar{1}1]}{\sqrt{3}}$, $\frac{[1\bar{1}\bar{1}]}{\sqrt{3}}$ et $\frac{[\bar{1}1\bar{1}]}{\sqrt{3}}$

Pour $\vec{n} = \frac{[111]}{\sqrt{3}}$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [10\bar{1}] / \sqrt{2} :$$

$$\bar{\sigma} \cdot \frac{\vec{b}}{b} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}/\sqrt{2} \\ 0 \\ -\sigma_{zz}/\sqrt{2} \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_{RSS} = \frac{\sigma_{xx} - \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [0\bar{1}1] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{-\sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

$$\bar{n} = [\bar{1}11] / \sqrt{3}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [110] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{-\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{\sqrt{6}}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [101] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{-\sigma_{xx} + \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [0\bar{1}1] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{-\sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

$$\bar{n} = [1\bar{1}1] / \sqrt{3}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [110] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{\sigma_{xx} - \sigma_{yy}}{\sqrt{6}}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [\bar{1}01] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{-\sigma_{xx} + \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [011] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{-\sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

$$\text{Pour } \bar{n} = [11\bar{1}] / \sqrt{3}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [\bar{1}10] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{-\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{\sqrt{6}}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [101] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{\sigma_{xx} - \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [011] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{\sigma_{yy} - \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

Contrainte résolue dans le repère $([1\bar{1}0], [110], [001])$:

Dans ce nouveau repère $\bar{\sigma}$ s'écrit
$$\begin{pmatrix} \sigma'_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma'_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma'_3 \end{pmatrix}$$

Il est plus simple pour les calculs de se ramener au repère cristallographique par une rotation de 45° autour de l'axe $[001]$. Dans ce repère, le tenseur des contraintes s'écrit alors :

$$\begin{pmatrix} \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{2} & \frac{\sigma_{xx} - \sigma_{yy}}{2} & 0 \\ \frac{\sigma_{xx} - \sigma_{yy}}{2} & \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{pmatrix}$$

Pour $\vec{n} = [111] / \sqrt{3}$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [\bar{1}10] / \sqrt{2} :$$

$$\bar{\sigma} \cdot \vec{b} = \begin{pmatrix} \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{2} & \frac{\sigma_{xx} - \sigma_{yy}}{2} & 0 \\ \frac{\sigma_{xx} - \sigma_{yy}}{2} & \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} = \begin{pmatrix} -\sigma_y / \sqrt{2} \\ \sigma_y / \sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \sigma_{RSS} = 0$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [10\bar{1}] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{\sigma_{xx} - \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [0\bar{1}1] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{-\sigma_{xx} + \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

$$\vec{n} = [\bar{1}11] / \sqrt{3}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [110] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = 0$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [101] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{-\sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [0\bar{1}1] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{-\sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

$$\vec{n} = [1\bar{1}1] / \sqrt{3}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [110] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = 0$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [\bar{1}01] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{-\sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [011] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{-\sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

$$\text{Pour } \vec{n} = [11\bar{1}] / \sqrt{3}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [\bar{1}10] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = 0$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [101] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{\sigma_{xx} - \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

$$\diamond \frac{\vec{b}}{b} = [011] / \sqrt{2} : \sigma_{RSS} = \frac{\sigma_{xx} - \sigma_{zz}}{\sqrt{6}}$$

ANNEXE 3:

Script MatLab

Programme d'extraction de l'intensité des satellites sur une cartographie expérimentale (pour comparaison avec les cartographies simulées)

```
frangeinf=input('ordre de la frange inferieur  ')
qxinf=input('position en qx de cette frange  ')
frangesup=input('ordre de la frange superieur  ')
qxsup=input('position en qx de cette frange  ')
integration=input('largueur integration  ')
nbintervalle=input('nombre d intervalle dans integration  ')
qzdepart=input('depart integration en qz  ')
qzfin=input('fin integration en qz  ')
pasqz=input('pas integration en qz  ')

periode=(qxsup-qxinf)/(frangesup-frangeinf);

for paf=0:(frangesup-frangeinf)
    dz=qzdepart:pasqz:qzfin;
    dxl=(qxinf+paf*periode-integration/2):(integration/nbintervalle):
(qxinf+paf*periode+integration/2);

    for n=1:length(dz)
        ztest=griddata(qxrel2,qzrel2,z,dx1,dz(n));
        ztestsat(n)=sum(ztest);
        franges(n,paf+1)=ztestsat(n);
    end;
end;
```

Avec matrice z = matrice de l'intensité mesurée expérimentalement
Et matrice $franges$ = matrice ou chaque colonne correspond à l'intensité d'un satellite

Il y a ensuite 2 façons de calculer la cartographie 'théorique'

Programme de calcul des cartographies sans approximation (sans FFT) pour échantillon de période 580 nm.

```
coefFemlab = 1e8 ;
a = 5.43088e-10;
Periode = 57.78e-8 ;
hauteurTranchee = 41e-8 ;

nx=[-0.00202:0.00004:0.00802];
```

```

nz=[3.990:0.0001:4.001];
qx=2*pi*nz/a;
qz=2*pi*nz/a;
nmax=266;
mmax=420;
lmax=length(qz);
kmax=length(qx);
Nx=4;
Nz=10;

xx=zeros(1,nmax*mmax);
for n=1:nmax
xx((n-1)*mmax+1:n*mmax)= - superPeriode/2 + Nx*(n-1)*a;
end;

for m=1:mmax
yygen(m)=hauteurTranchee-Nz*m*a;
end;

yy=[];
for n=1:nmax
yy=[yy,yygen];
end;

rxx = xx + postinterp(fem,'u',[xx*coefFemlab;yy*coefFemlab])/coefFemlab;
ryy = yy + postinterp(fem,'v',[xx*coefFemlab;yy*coefFemlab])/coefFemlab;
epsxxb=postinterp(fem,'ex_pn',[xx*coefFemlab;yy*coefFemlab]);
epsz zb=postinterp(fem,'ey_pn',[xx*coefFemlab;yy*coefFemlab]);
norm= postinterp(feminit,'sx_pn2',[xx*coefFemlab;yy*coefFemlab])/coefFemlab;

for n=1:nmax
for m=1:mmax
rx1(m,n)=rxx((n-1)*mmax+m);
ry1(m,n)=ryy((n-1)*mmax+m);
epsxx(m,n)=epsxxb((n-1)*mmax+m);
epszz(m,n)=epsz zb((n-1)*mmax+m);
adefzz(m,n)=a * ( epszz(m,n) + 1 );
adefxx(m,n)=a * ( epsxx(m,n) + 1 );
if norm((n-1)*mmax+m)==0;
A(m,n)=1;
else
A(m,n)=0;
end;
end;
end;

```

calcul de l'intensité diffractée

```
for l=1:lmax
```

```
for k=1:kmax
```

```
R=A.*(sin(Nz.*adefzz*qz(l)/2)./sin(qz(l)*adefzz/2)).*(sin(Nx*adefxx*qx(k)/2)./sin(qx(k)*adefxx/2)).*cos(qx(k)*rx1+qz(l)*ry1);  
R=sum(sum(R));
```

```
I=A.*(sin(Nz.*adefzz*qz(l)/2)./sin(qz(l)*adefzz/2)).*(sin(Nx*adefxx*qx(k)/2)./sin(qx(k)*adefxx/2)).*sin(qx(k)*rx1+qz(l)*ry1);  
I=sum(sum(I));  
F004(l,k)=(R*R+I*I);  
end;  
end;
```

convolution avec une fonction de laue

```
a = 5.43088e-10;  
N=8;
```

```
for k=1:length(qx)  
g(k)=sin(N*superPeriode/(2)*qx(k))/sin(superPeriode/(2)*qx(k));  
end;  
Z=g'.*g';
```

```
for l=1:lmax  
for k=1:kmax  
Ft004(l,k)=F004(l,k)*Z(k);  
end;  
end;
```

```
pcolor(nx,nz,log(Ft004));shading interp;
```

Programme de calcul et de comparaison des cartographies par utilisation de la FFT pour échantillon de période 580 nm.

Extraction du champ de déplacement suivant x et z (appelé y dans Femlab) induit par chargement thermique dans le liner et l'oxyde de remplissage

```
coefFemlab = 1e9 ;  
a = 5.430e-10;  
hauteurTranchee = 0 ;  
Nx=4;  
Nz=6;  
nmax=269;  
mmax=1401;  
superPeriode = Nx*a*nmax ;
```

```
xx=zeros(1,nmax*mmax);  
for n=1:nmax  
xx((n-1)*mmax+1:n*mmax)= - superPeriode/2 + Nx*(n-1)*a;
```

```

end;

for m=1:mmax
    yygen(m)=hauteurTranchee-Nz*m*a;
end;

yy=[];
for n=1:nmax
    yy=[yy,yygen];
end;

T1 = postinterp(femT1,'v2',[xx*coefFemlab;yy*coefFemlab])/coefFemlab;
T2 = postinterp(femT2,'v2',[xx*coefFemlab;yy*coefFemlab])/coefFemlab;
T3 = postinterp(femT1,'u2',[xx*coefFemlab;yy*coefFemlab])/coefFemlab;
T4 = postinterp(femT2,'u2',[xx*coefFemlab;yy*coefFemlab])/coefFemlab;

norm= postinterp(feminit,'sx_pn2',[xx*coefFemlab;yy*coefFemlab])/coefFemlab;

for n=1:nmax
    for m=1:mmax
        y(m,n)= ( hauteurTranchee -Nz*m*a ) ;
        T1y(m,n)=T1((n-1)*mmax+m);
        T2y(m,n)=T2((n-1)*mmax+m);
        T1x(m,n)=T3((n-1)*mmax+m);
        T2x(m,n)=T4((n-1)*mmax+m);
        if norm((n-1)*mmax+m)==0;
            A(m,n)=1;
        else
            A(m,n)=0;
        end;
    end;
end;
end;

```

Calcul de la cartographie par FFT pour différents chargement thermique et comparaison directe avec la cartographie expérimentale

```

a=5.43e-10;
initTy=-100*T1y+0*T2y;
initTx=-100*T1x+0*T2x;
qz004=2*pi*4/a;

% normalisation de l intensite experimentale

maxexp=max(max(expe.*select));
expe=expe/maxexp;

for tek = 1:40
    for paf=1:40
        ry=initTy + 10*tek*T1y + 5*paf*T2y;
        rx=initTx + 10*tek*T1x + 5*paf*T2x;
    end;
end;

```

```
Afft=A.*exp(i*(qz004*(ry-rx)));
Fourier=fft2(Afft);
amplitude=fftshift(Fourier);
intensity=amplitude.*conj(amplitude);
simul=intensity(617:743,137:145);
maxsimul=max(max(simul.*select));
simul=simul/maxsimul;
diff=(((simul-expe).*(simul-expe))./expe).*select;
chi2(tek,paf)=sum(sum(diff));
end;
end;
min(min(chi2))
figure;pcolor(chi2);
```


**Contraintes locales induites par le procédé ‘Shallow Trench Isolation’ : Diffraction X
haute résolution et simulation par éléments finis**

Thèse en Physique spécialité Matériaux, Microélectronique et nanosciences

EBERLEIN Michel

Le 24 Janvier 2008 à 11h dans l’amphithéâtre P. ROUARD

Rapporteurs :

Mr A. Poncet, Professeur

Mr P. Goudeau, Directeur de recherche CNRS

Composition du Jury :

Mr R. Madar, Directeur de recherche CNRS

Mr T. Pedron, Directeur ‘Technologies Avancées’ Atmel Rousset

Mme S. Escoubas, Maître de conférence

Mr O. Thomas, Professeur

Résumé de la thèse :

La procédé STI (« Shallow Trench Isolation ») est couramment utilisé dans la microélectronique afin d’isoler électriquement les dispositifs entre eux. Les nombreuses étapes de ce procédé engendrent des contraintes mécaniques très importantes qui peuvent nuire à la fiabilité. L’originalité de la diffraction X haute résolution est d’utiliser l’intensité diffractée par le silicium déformé périodiquement comme empreinte du champ de déformation locale. Les mesures ont porté sur des structures de période allant de 2 μm à 200 nm, avec des lignes de silicium de largeur inférieure à 100 nm pour les plus petites périodes. Pour les échantillons de période submicronique, un second pic de diffraction apparaît sur les cartographies du réseau réciproque. Ce pic est attribué à une déformation homogène du silicium entre les tranchées et permet une mesure directe et sans modèle des déformations. L’effet sur les déformations et les contraintes de variations géométriques et de procédé ont été ainsi étudiées. Cette méthode expérimentale s’appuie sur des simulations numériques par éléments finis.

Mots clefs :

Diffraction X ; Modélisation Eléments finis ; contrainte ; déformation ; silicium ; Microélectronique ; STI.