

Université de Montréal

**Élaboration d'un simulateur de gravure par plasma de haute densité basé sur une  
approche cellulaire pour l'étude de profils dans divers matériaux**

par  
Jérôme Saussac

Département de Physique  
Faculté des arts et des sciences

Thèse présentée à la Faculté des études supérieures  
en vue de l'obtention du grade de Philosophiæ Doctor (Ph.D.)  
en Physique

Octobre, 2009

© Jérôme Saussac, 2009.

Université de Montréal  
Faculté des études supérieures

Cette thèse intitulée:

**Élaboration d'un simulateur de gravure par plasma de haute densité basé sur une  
approche cellulaire pour l'étude de profils dans divers matériaux**

présentée par:

Jérôme Saussac

a été évaluée par un jury composé des personnes suivantes:

Michel Moisan,	président
Joëlle Margot,	directrice de recherche
Mohamed Chaker,	codirecteur
François Vidal,	membre du jury
Jean-Pierre Boeuf,	examineur externe
Antonella Badia,	représentant le doyen de la FES

Thèse acceptée le: 19 octobre 2009

## RÉSUMÉ

La réalisation de dispositifs à des dimensions sous-micrométriques et nanométriques demande une maîtrise parfaite des procédés de fabrication, notamment ceux de gravure. La réalisation de ces dispositifs est complexe et les exigences en termes de qualité et de géométrie des profils de gravure imposent de choisir les conditions opératoires les mieux adaptées. Les simulations de l'évolution spatio-temporelle des profils de gravure que nous proposons dans cette thèse s'inscrivent parfaitement dans ce contexte. Le simulateur que nous avons réalisé offre la possibilité de mieux comprendre les processus qui entrent en jeu lors de la gravure par plasma de profils dans divers matériaux. Il permet de tester l'influence des paramètres du plasma sur la forme du profil et donc de déterminer les conditions opératoires optimales. La mise au point de ce simulateur s'appuie sur les concepts fondamentaux qui gouvernent la gravure par plasma. À partir de l'état des lieux des différentes approches numériques pouvant être utilisées, nous avons élaboré un algorithme stable et adaptable permettant de mettre en évidence l'importance de certains paramètres clés pour la réalisation de profils de gravure par un plasma à haute densité et à basse pression. Les capacités de cet algorithme ont été testées en étudiant d'une part la pulvérisation de *Si* dans un plasma d'argon et d'autre part, la gravure chimique assistée par les ions de  $SiO_2/Si$  dans un plasma de chlore. Grâce aux comparaisons entre profils simulés et expérimentaux, nous avons montré l'importance du choix de certains paramètres, comme la nature du gaz utilisé et la pression du plasma, la forme initiale du masque, la sélectivité masque/matériau, le rapport de flux neutre/ion, etc. Nous avons aussi lié ces paramètres à la formation de défauts dans les profils, par exemple celle de facettes sur le masque, de parois concaves, et de micro-tranchées. Enfin, nous avons montré que le phénomène de redépôt des atomes pulvérisés entre en compétition avec la charge électrique de surface pour expliquer la formation de profils en V dans le *Pt* pulvérisé par un plasma d'argon.

**Mots clés:** plasma, gravure, simulation, silicium, platine, micro-tranchées, redépôt.

## ABSTRACT

Sub-micrometer and nanometer-size device manufacturing requires perfect control of fabrication processing, in particular plasma etching. The fabrication of such devices is complex and the requirements in terms of quality and geometry of the etching profiles impose to use the best adapted operating conditions. Simulation of space and time-etching profile evolution that is proposed in this thesis addresses these issues. The simulator yields a better understanding of the fundamental mechanisms that occur during plasma etching of features in various materials. It enables to test the influence of plasma parameters on the profile shape and thus to determine the optimal operating conditions. The development of the simulator is based on the fundamental concepts in plasma etching. From thorough review of the various numerical approaches available to simulate etching profile evolution, we have developed a stable and flexible algorithm that enables to emphasize the importance of some key-parameters for the realization of etching profiles by high-density and low-pressure plasma. The capabilities of this algorithm were tested on the study of *Si* sputtering in an argon plasma and of ion-assisted chemical etching of *SiO<sub>2</sub>/Si* in a chlorine plasma. From comparisons between simulated and experimental profiles, we have shown the importance of some parameters, like the nature of the gas, the plasma pressure, the initial shape of the mask, the mask/material selectivity, the neutral/ion flux ratio, etc. We also linked these parameters to the formation of defects in the profile, for exemple mask facetting, sidewall bowing and microtrenching. Finally, we have shown that redeposition of sputtered atoms compete with electric surface charging to explain V-shape profiles observed on *Pt* sputtered in argon plasmas.

**Keywords: plasma, etching, profile, simulation, silicon, platinum, redeposition, microtrenching**

## TABLE DES MATIÈRES

<b>RÉSUMÉ</b> . . . . .	<b>iii</b>
<b>ABSTRACT</b> . . . . .	<b>iv</b>
<b>TABLE DES MATIÈRES</b> . . . . .	<b>v</b>
<b>LISTE DES FIGURES</b> . . . . .	<b>ix</b>
<b>LISTE DES SIGLES</b> . . . . .	<b>xix</b>
<b>NOTATION</b> . . . . .	<b>xx</b>
<b>DÉDICACE</b> . . . . .	<b>xxiii</b>
<b>REMERCIEMENTS</b> . . . . .	<b>xxiv</b>
<b>INTRODUCTION</b> . . . . .	<b>1</b>
<b>CHAPITRE 1 : INTRODUCTION : GRAVURE PAR PLASMA ET SIMU- LATION DE L'ÉVOLUTION DES PROFILS</b> . . . . .	<b>5</b>
1.1 La gravure par plasma . . . . .	6
1.1.1 Généralités . . . . .	6
1.1.2 Utilisation de plasmas pour la reproduction de motifs dans un matériau de dimensions micro- et nanométriques . . . . .	9
1.2 Évolution des profils de gravure . . . . .	10
1.3 Mécanismes de gravure par plasma . . . . .	14
1.3.1 La gravure purement chimique ou gravure spontanée . . . . .	14
1.3.2 Formation et importance de la gaine de plasma . . . . .	15
1.3.3 La pulvérisation . . . . .	16

1.3.4	La gravure chimique assistée par les ions . . . . .	20
1.4	Simulation de profils de gravure . . . . .	24
1.4.1	Un simulateur prédictif . . . . .	24
1.4.2	Les différentes approches . . . . .	25
1.5	Conclusion . . . . .	28
<b>CHAPITRE 2 : PRÉSENTATION DU SIMULATEUR . . . . .</b>		<b>29</b>
2.1	Fonctionnement général . . . . .	30
2.2	État des cellules . . . . .	34
2.3	Rendement de gravure . . . . .	36
2.3.1	Forme analytique du rendement . . . . .	36
2.3.2	Dépendance angulaire du rendement de gravure . . . . .	40
2.4	Traitement des particules incidentes . . . . .	42
2.4.1	Nombre d'ions, de neutres et distribution angulaire . . . . .	42
2.4.2	Calcul des trajectoires . . . . .	43
2.4.3	Réflexion des particules et interactions avec la surface : calcul de la normale . . . . .	45
2.5	Accumulation de charges . . . . .	47
2.6	Redépôt . . . . .	49
2.7	Conclusion . . . . .	50
<b>CHAPITRE 3 : SIMULATION DES PROFILS DE GRAVURE : PULVÉRISATION ET GRAVURE CHIMIQUE ASSISTÉE PAR LES IONS . . . . .</b>		<b>53</b>
3.1	Pulvérisation du silicium dans l'argon . . . . .	55
3.1.1	Exemple d'évolution d'un profil de gravure . . . . .	56
3.1.2	Distribution angulaire des ions incidents . . . . .	58
3.1.2.1	Forme de la distribution angulaire des ions en fonction de la pression du plasma . . . . .	58

3.1.2.2	Effet de la distribution angulaire des ions sur le profil de gravure . . . . .	60
3.1.3	Effet de la réflexion des ions sur les parois du motif . . . . .	62
3.1.3.1	Micro-tranchées . . . . .	62
3.1.3.2	Dispersion angulaire des particules réfléchies . . . . .	63
3.1.4	Influence de la forme initiale du masque, sélectivité et formation de "facettes" . . . . .	67
3.1.4.1	Influence de la forme initiale du masque . . . . .	67
3.1.4.2	Sélectivité matériau/masque et formation de "facettes" sur le masque . . . . .	68
3.2	Pulvérisation du $SrTiO_3$ ( <i>STO</i> ) dans l'argon . . . . .	71
3.3	Gravure chimique assistée par les ions du silicium dans un plasma de chlore . . . . .	73
3.3.1	Simulation des profils à basse et haute pression . . . . .	74
3.3.1.1	Rapport de flux neutres/ions et sélectivité . . . . .	74
3.3.1.2	Cas à basse pression (2 mTorr) . . . . .	76
3.3.1.3	Cas à haute pression (10 mTorr) . . . . .	79
3.3.1.4	Effet du rapport de flux . . . . .	83
3.3.2	Dépendance angulaire du rendement de gravure . . . . .	84
3.4	Limite de validité du simulateur . . . . .	89
3.5	Conclusion . . . . .	92

#### **CHAPITRE 4 : PULVÉRISATION DU PLATINE DANS L'ARGON : EFFET DE CHARGE ÉLECTRIQUE ET REDÉPÔT . . . . . 94**

4.1	Gravure excessive du masque : sélectivité et forme initiale du masque . . . . .	95
4.1.1	Sélectivité . . . . .	96
4.1.2	Forme initiale du masque . . . . .	98
4.2	Accumulation de charges électriques sur la surface du masque . . . . .	99

4.3	Redépôt des espèces pulvérisées . . . . .	104
4.3.1	Deux types de redépôt . . . . .	104
4.3.2	Distribution angulaire des atomes pulvérisés . . . . .	106
4.3.2.1	Ion à incidence normale . . . . .	106
4.3.2.2	Ion à incidence oblique . . . . .	109
4.3.3	Simulation du redépôt direct et indirect . . . . .	110
4.3.3.1	Redépôt direct . . . . .	110
4.3.3.2	Redépôt indirect . . . . .	111
4.3.4	Simulation du redépôt lors de la pulvérisation du platine dans l'argon . . . . .	112
4.3.4.1	Redépôt direct . . . . .	112
4.3.4.2	Redépôt direct et indirect . . . . .	115
4.3.4.3	Profil en V . . . . .	116
4.3.5	Effet du redépôt pour la gravure de <i>Si</i> dans un plasma de chlore	117
4.3.5.1	Cas à basse pression (2 mTorr) . . . . .	117
4.3.5.2	Cas à haute pression (10 mTorr) . . . . .	119
4.4	Conclusion . . . . .	121
	<b>CONCLUSION ET PERSPECTIVES . . . . .</b>	<b>123</b>
	<b>BIBLIOGRAPHIE . . . . .</b>	<b>127</b>



## LISTE DES FIGURES

1	Loi de Moore et "galette" de silicium. a) Loi de Moore : nombre de transistors en fonction de la date d'introduction, d'après [1]. b) Exemple de "galette" de silicium, d'après [2]. . . . .	4
1.1	Représentation schématique de l'ensemble plasma/gaine/masque/matériau. Dans le plasma, les collisions entre les particules se font dans toutes les directions. Dans la gaine, les ions sont accélérés par le champ électrique, ils gagnent en directionnalité et en énergie, les neutres étant distribués de façon quasi-isotrope. . . . .	7
1.2	Photolithographie et gravure. a) Dépôt du matériau. b) Dépôt de la résine photosensible. c) Application du masque et exposition au rayonnement UV. d) Développement. e) Gravure du matériau selon le masque. f) Retrait de la résine. D'après [5]. La figure g) est un exemple d'un profil de gravure de silicium pour lequel le masque est encore présent [6]. . . . .	11
1.3	Exemples de profils de gravure. a) Vitesses de gravure verticale ( $V_V$ ) et horizontale ( $V_H$ ). b) Profil à fort rapport d'aspect. c) Profil à faible rapport d'aspect. d) Profil anisotrope. e) Profil isotrope. . . . .	12
1.4	Représentation de la gaine de plasma. a) Formation de la gaine électrostatique : 1) réflexion d'un électron lent, 2) traversée d'un électron rapide, 3) injection d'un ion positif et 4) réflexion d'un ion négatif, b) schéma de l'évolution du potentiel dans la gaine. . . . .	17

1.5	Différents scénarii de pulvérisation. a) Un atome de la surface est directement éjecté lors d'une première collision, b) un atome de la surface est éjecté par collision secondaire de l'atome cible, c) l'ion incident pénètre dans le matériau, subit des réflexions puis éjecte un atome de surface, ou d) l'ion pousse l'atome cible dans le matériau et celui-ci ressort après de multiples collisions [14]. . . . .	19
1.6	Rendement de gravure en fonction de l'angle d'incidence de l'ion mesuré par rapport à la normale à la surface. a) Rendement de gravure du silicium par un plasma de chlore, Chang <i>et al.</i> [15], b) du silicium par un plasma d'argon, Vitale <i>et al.</i> [17], et c) de divers matériaux et divers gaz, Gutsche <i>et al.</i> [16]. . . . .	21
1.7	Gravure chimique assistée par les ions. Vue schématique du flux d'ions incidents sur un substrat en silicium. . . . .	22
1.8	Vitesse de gravure du Si en présence ou en absence des flux de $XeF_2$ et $Ar^+$ . La vitesse de gravure des flux combinés est plus grande que dans le cas de flux pris séparément [18]. . . . .	23
2.1	Domaine de simulation discrétisé : grille de cellules carrées associées à un état : "vide", "matériau", "masque", "interface plasma-masque" ou "interface plasma-matériau" . . . . .	30
2.2	Schéma du code : plusieurs paramètres d'entrée sont utilisés pour le calcul des flux, des rendements de gravure, etc. En sortie, on obtient une image au format PNG du profil gravé. . . . .	32
2.3	Voisinage de la cellule Q pour un domaine de simulation de N cellules horizontales et N cellules verticales. . . . .	35

2.4	Illustration du changement d'état : initialement chaque cellule contient $n$ atomes (ici 100), ce nombre évolue sous l'effet de l'interaction avec le plasma. Les cellules "interface plasma-matériau" contiennent ici 80, 10 et 40 atomes. La cellule du milieu passe de 10 à 0 atomes, elle change d'état et devient "vide", par conséquent la cellule du bas devient "interface plasma-matériau" . . . . .	36
2.5	Impact du rendement "virtuel" sur la rugosité de la surface. Sur la figure a), la surface présente une rugosité anormale, le facteur $r = 1$ n'est pas raisonnable. Sur la figure b), $r = 10$ , il faut ici 10 ions incidents pour "vider" une cellule. Dans ce cas, la surface est lisse. . . . .	39
2.6	Définition de l'angle d'incidence. . . . .	40
2.7	Rendements de gravure relatifs en fonction de l'angle d'incidence des ions pour du platine, du silicium et de l'oxyde de silicium dans des plasmas d'argon et de chlore [12] [15] [16]. . . . .	41
2.8	Distribution aléatoire de points à l'aide de la fonction ran2. Exemple pour 100, 1000, 10000 et 100000 tirages. La répartition des points est homogène à partir de 10000 tirages. . . . .	43
2.9	Conditions initiales pour les particules. Elles partent du haut du domaine de simulation à une position horizontale choisie aléatoirement. L'angle initial est déterminé à partir des distributions angulaires : Gaussienne pour les ions (dont la largeur à mi-hauteur dépend de la pression), et en cosinus pour les neutres. . . . .	44
2.10	Calcul de la pente à proximité de la cellule cible : les coordonnées des cellules de surface incluses dans un rayon $R$ sont stockées, une régression linéaire nous donne la pente recherchée. . . . .	46
2.11	Calcul de l'angle entre l'ion incident et la normale à la surface. L'angle après réflexion non spéculaire est compris dans un cône $\theta_s \pm \Delta\theta_s$ . . . .	47

2.12	Accumulation de charges électriques sur la surface du masque isolant. Le champ électrique induit $\vec{E}_V$ perpendiculaire au substrat accélère les ions. Le champ $\vec{E}_S$ perpendiculaire à la surface du masque modifie les trajectoires des ions. . . . .	48
2.13	Pour illustrer le redépôt : les cellules de surface contiennent ici 80, 90 et 40 atomes. La cellule du milieu reçoit 40 atomes, elle passe de 90 à 100 atomes. Elle change d'état et devient "matériau", les cellules voisines reçoivent équitablement le surplus d'atomes, ici plus 10 atomes chacune. La cellule dans l'état "vide" la plus proche reçoit 10 atomes et devient alors cellule de surface. . . . .	50
2.14	Diagramme des diverses étapes de l'algorithme. . . . .	52
3.1	Exemple de profil de gravure : chaque image représente le profil à des instants successifs de la gravure. Le domaine de simulation est de $200 \times 200$ cellules de $10 \text{ nm}$ . La tranchée a une largeur de $0.5 \mu\text{m}$ et une profondeur de $0.75 \mu\text{m}$ à la fin de la gravure. L'épaisseur du masque est de $0.4 \mu\text{m}$ . . . . .	57
3.2	Représentation schématique de la variation de la largeur à mi-hauteur de la distribution angulaire des ions incidents avec la pression selon les données expérimentales. . . . .	59
3.3	Forme des micro-tranchées en fonction de la distribution angulaire des ions incidents. Le motif a une largeur de $0.6 \mu\text{m}$ et une profondeur de $0.75 \mu\text{m}$ . Deux LMH pour la distribution angulaire des ions incidents sont utilisées : a) 5 degrés et b) 10 degrés, correspondant à des pressions de 0.5 et 2 mTorr. Dans les deux cas, les ions incidents sont réfléchis et des micro-tranchées se forment à la base des profils. La forme de ces micro-tranchées varie en fonction de la pression. . . . .	61

- 3.4 Réflexion des ions sur les parois. a) Profil de gravure avec réflexion des ions à incidence rasante sur les parois et micro-tranchées au pied du motif. b) Dans ce cas, on ne prend pas en compte la réflexion, les micro-tranchées sont absentes. . . . . 63
- 3.5 Simulation de la réflexion non-spéculaire pour différentes valeurs de  $n$ . Pour la figure a),  $n = 50$ , pour b),  $n = 100$ , et pour c),  $n = 1000$ . La forme des micro-tranchées varie fortement avec  $n$ . La figure d) schématise la réflexion diffuse. La dispersion autour de la direction spéculaire augmente (*i.e.*  $\alpha$  augmente) si  $n$  diminue, et inversement. . . . . 64
- 3.6 Réflexion diffuse et zone d'impact de l'ion réfléchi. Dans le cas de la réflexion spéculaire, l'ion réfléchi arrive près de la paroi au fond de la tranchée ( $0.026 \mu m$ ). Pour une réflexion non spéculaire, avec une déviation de 5 degrés, l'ion arrive plus loin de la paroi ( $0.092 \mu m$ ). Le choix de la déviation maximale est donc déterminant pour évaluer la forme et la taille de la micro-tranchée. . . . . 66
- 3.7 Effet de la pente du masque. Sur la figure b), le masque présente des parois inclinées à 70 degrés. Les ions incidents vont alors être réfléchis du masque vers la paroi opposée du matériau. Le profil va aussi présenter une gravure sous-masque et des parois anormalement gravées. . . . . 68
- 3.8 De a) à d) : évolution du profil de gravure du  $Si$  masqué par du  $SiO_2$ . a) profil avant la gravure. b) des facettes se forment aux coins du masque sous l'impact des ions incidents. c) à d) les parois du masque s'inclinent. d) la forte gravure horizontale du masque "découvre" le matériau. Ainsi, la faible sélectivité engendre un perte de l'anisotropie de la gravure. . . . . 70

- 3.9 Image MEB du STO gravé dans un plasma d'argon [61] (a) et profil simulé (b). La simulation représente correctement la légère courbure de la paroi. La micro-tranchée a également une forme similaire. La profondeur de la micro-tranchée simulée est la même que sur le profil expérimental, soit environ  $0.1 \mu m$ . . . . . 72
- 3.10 Comparaison entre le profil simulé et expérimental d'une tranchée dans du *Si*, masqué par du *SiO<sub>2</sub>*, dans un plasma de chlore à 2 mTorr. La figure a) représente le profil simulé et b) le profil expérimental, d'après [66]. Globalement, les proportions sont semblables et l'accord est bon. Les figures c) et d) sont des agrandissements des micro-tranchées. La forme et les dimensions simulées sont quasi-identiques à celles de l'expérience. 77
- 3.11 Formation de facettes aux coins supérieurs du masque. Initialement, le masque présente des coins à angle droit (a et c), à la fin de la gravure les coins sont arrondis (b et d). Les facettes du profil expérimental [66] (e) sont correctement simulées sur (d). . . . . 78
- 3.12 Agrandissement de la jonction entre le masque (*SiO<sub>2</sub>*) et le matériau (*Si*). La gravure sous-masque observée [66] (b) est bien simulée (a). . . . . 79
- 3.13 Profil de gravure du *Si* dans le chlore pour une pression de 10 mTorr. a) Profil expérimental, d'après [66]. b) Profil simulé. Les parois sont concaves en haut du profil à cause de l'action combinée des neutres et des ions. . . . . 80
- 3.14 Évolution temporelle de la gravure du *Si* dans le chlore pour une pression de 10 mTorr. Des micro-tranchées apparaissent dès le début du processus à cause de la légère pente initiale du masque (b-1)). Des parois concaves se forment progressivement (b-2) à b-4)) sous l'action combinée des ions et des neutres. Notons que le halo apparent sur les images MEB est dû à un effet d'optique. . . . . 82

3.15	Effet du rapport de flux. La figure a) est le cas précédemment étudié avec $J_n/J_i = 66$ . La figure b) représente le cas d'un fort rapport de flux ( $J_n/J_i = 280$ ), le profil présente une forte gravure sous-masque ainsi que des parois beaucoup plus concaves. . . . .	83
3.16	Rendement de gravure en fonction de l'angle d'incidence de l'ion pour le $SiO_2$ et le $Si$ dans un plasma de chlore/argon. Le rendement diminue à partir d'une incidence de 40 degrés pour le $Si$ . Pour le $SiO_2$ , le rendement présente un maximum autour de 65 degrés [44]. . . . .	86
3.17	Représentation des rendements relatifs utilisés pour nos simulations dans le chlore et profils de gravure correspondants. Pour le $Si$ , les particules sont réfléchies au delà de 80 degrés, le rendement vaut alors 0.17 (a). Pour le $SiO_2$ , le rendement est encore important à 80 degrés (0.43) ; nous considérons alors que les ions sont réfléchis pour un angle supérieur à 85 degrés (b). La figure (d) présente une gravure sous-masque plus importante que sur (c). Les parois sont "protégées" du flux ionique par le masque, les micro-tranchées sont absentes. . . . .	87
3.18	Profil de gravure dans $Si$ avec un plasma de chlore, largeur du motif 15 nm. a) Motif de 15 cellules de largeur (taille de chaque cellule : 1 nm). b) Motif de 30 cellules de largeur (0.5 nm). c) et d) agrandissements des profils. Il n'y a pas de micro-tranchées sur le motif de 15 cellules de largeur. Elles sont, par contre, présentes sur celui de 30 cellules. . . . .	90
3.19	Calcul du déplacement horizontal $x$ d'un ion réfléchi depuis la paroi avec un angle $\gamma$ par rapport à la verticale. Le déplacement vertical est $p$ . . . . .	92
4.1	Profil en V lors de la gravure du platine dans un plasma d'argon. La largeur de la tranchée est $0.5 \mu m$ , et la profondeur de $0.6 \mu m$ . Les parois présentent une pente importante d'environ 60 degrés par rapport à l'horizontale. D'après [51]. . . . .	96

- 4.2 Mécanisme de récession horizontale du masque. Si la vitesse de gravure horizontale du masque est importante alors, à l'instant  $t_2$ , le masque présente une "ouverture" plus importante qu'à l'instant  $t_1$  et des parois inclinées se forment progressivement. Les flèches représentent le déplacement horizontal du masque dû à une gravure latérale excessive. . . . . 97
- 4.3 Sélectivité et vitesse de gravure en fonction du champ magnétique. À 600 Gauss, la sélectivité est excellente, d'environ 0.16. D'après [71]. . . . . 98
- 4.4 Simulation de la gravure du platine dans un plasma d'argon. La pente initiale du masque est de 75 degrés. Le profil simulé ne correspond pas à l'observation. . . . . 99
- 4.5 Trajectoires des ions incidents. a) Trajectoires des ions incidents sans accumulation de charges électriques sur la surface du masque. b) Déflexion des trajectoires des ions par le champ électrique perpendiculaire au masque. 101
- 4.6 Profil de gravure dans le platine avec un plasma d'argon. La figure a) est la meilleure représentation du profil expérimental, avec une probabilité d'échange de charge de 0.01. Les figures b) et c) sont obtenues avec  $p = 0.05$  et  $p = 1$ , respectivement ; une forme en "entonnoir" apparaît ainsi qu'une gravure sous masque absente sur le profil expérimental. Dans les trois cas, la pente de la paroi est d'environ 60 degrés par rapport à l'horizontale, soit sensiblement identique à celle du profil expérimental (Fig. 4.1). . . . . 102
- 4.7 Image MEB de profils de gravure dans le platine avec un plasma d'argon. a) À 0.1 mTorr, on observe une paroi inclinée et un faible redépôt à la jonction masque-matériau. La profondeur de platine est de  $0.4 \mu m$ . b) À 10 mTorr, la pente est plus importante, de même que le redépôt sur le masque. La profondeur de platine est de  $0.2 \mu m$ . D'après [76] . . . . . 105



- 4.8 Éjection d'un atome secondaire en régime de "poussage". L'ion incident heurte un atome de surface. Celui-ci "pousse" un atome secondaire qui est éjecté selon un angle rasant. . . . . 108
- 4.9 Distribution angulaire en sous-cosinus pour des atomes pulvérisés par un ion à incidence normale. Si l'énergie de l'ion diminue (indiquée par la flèche descendante), la distribution "s'écrase". D'après [79] . . . . . 109
- 4.10 Profil de gravure dans le platine avec un plasma d'argon. a) Sur l'image MEB, on observe une paroi inclinée et peu de redépôt sur la surface du masque. b) Profil simulé avec un angle d'éjection privilégié de 50 degrés pour les ions à incidence normale et une probabilité de collage platine-masque de 1. Le redépôt est largement surestimé. . . . . 113
- 4.11 Profils simulés pour différents angle d'éjection des atomes pulvérisés par les ions à incidence normale. a) Angle d'éjection de 40 degrés : pente d'environ 75 degrés par rapport à l'horizontale. b) Angle de 45 degrés : pente d'environ 80 degrés. c) Profil expérimental : pente d'environ 70 degrés. d) Angle de 50 degrés : profil le plus conforme au profil expérimental, pente d'environ 70 degrés. . . . . 114
- 4.12 Profil de gravure dans le platine à une pression de 10 mTorr. a) Le profil expérimental présentant une quantité importante d'atomes redéposés sur la surface du masque. b) Le profil simulé est en bon accord avec le profil expérimental. La pente de la paroi (environ 65 degrés par rapport à l'horizontale) et la quantité de platine redéposée sur le masque sont conformes aux observations. . . . . 116
- 4.13 Profil de gravure en V dans le platine. a) Profil expérimental : pentes d'environ 60 degrés. b) Profil simulé avec un angle d'éjection des atomes pulvérisés par les ions à incidence normale de 50 degrés : pentes conformes d'environ 60 degrés. c) Profil simulé avec un angle de 40 degrés : beaucoup moins satisfaisant. . . . . 117

- 4.14 Simulation du redépôt pour du *Si* gravé avec un plasma de chlore. a) Profil simulé sans redépôt (idem paragraphe 3.3.1.2). b) Profil simulé en tenant compte du redépôt. c) Profil expérimental, d'après [66]. . . . . 119
- 4.15 Simulation du redépôt pour la gravure du *Si* avec un masque de *SiO<sub>2</sub>* dans un plasma de chlore à 10 mTorr. a) Profil simulé sans tenir compte du redépôt (idem paragraphe 3.3.1.3). b) Profil simulé avec une probabilité de collage du *SiCl<sub>4</sub>* de 0.1 sur le *Si* et 0.05 sur le *SiO<sub>2</sub>*. c) Profil simulé avec les probabilités de collage de 0.2 et 0.1 sur le *Si* et le *SiO<sub>2</sub>*, respectivement. d) Profil expérimental, d'après [66]. . . . . 121

## LISTE DES SIGLES

$Ar^+$	ion argon
$Cl$	chlore
$Cl^+$	ion chlore
$F$	fluor
$(F_2)_{gaz}$	molécule de fluor dans le plasma
$(F_2)_{ads}$	molécule de fluor adsorbée
HF	haute fréquence
HPR-504	résine
ICP	inductive Coupled Plasma
LMH	largeur à Mi-Hauteur
MEB	microscope Électronique à Balayage
PECVD	plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition
PMMA	résine
RCE	résonance cyclotronique électronique
RF	radio fréquence
RIE	reactive Ion Etching
$Si$	silicium
$SiO_2$	oxyde de silicium
STO	$SrTiO_3$
UV	ultra-Violet

## NOTATION

a	dimension d'une cellule
acc	dacteur d'accélération
$A_F$	donstante
$\alpha$	dacteur sans dimension
$a_{min}$	taille minimale d'une cellule
$\beta$	dombre d'atomes désorbés par produit de réaction
dt	pas de temps
du	pas de temps pour le déplacement
e	charge électrique élémentaire
$\varepsilon$	permittivité du plasma
$E_a$	énergie d'activation
$E_{ion}$	énergie de l'ion
$E_i$	énergie moyenne des ions
$ER_\chi$	taux de gravure chimique
$ER_\varphi$	taux de gravure physique
$\vec{E}_S$	vecteur champ électrique induit
$E_{seuil}$	énergie seuil
ER	taux de gravure
$\vec{E}_V$	vecteur champ électrique
f	fonction d'interface
$\gamma$	angle après réflexion
$\Gamma$	facteur de transfert d'énergie pour les collisions élastiques
$J_i$	flux ionique
$J_n$	flux de neutres
k	volume de matière retiré par particule incidente par unité d'énergie

$k_B$	constante de Boltzmann
$k_n$	taux de désorption spontanée
$m_i$	masse de l'ion
N	nombre de cellules horizontales ou verticales
$n$	entier
$\vec{n}$	vecteur normal
$N_a$	nombre d'atomes par cellule
$N_i$	nombre d'ion incidents
$n_{ip}$	densité ionique du plasma
$N_n$	nombre de neutres incidents
$n_{np}$	densité de neutres du plasma
$N_t$	densité du matériau
$n_x$	densité de l'espèce x
p	probabilité d'échange de charge
Q	numéro d'une cellule
$Q_i$	charge de l'ion
$Q_S$	charge de la surface
R	rayon
r	rapport entre le nombre initial d'atomes par cellule et le rendement virtuel
RR	probabilité de retour
$\vec{r}_{i0}$	position initiale de l'ion
$\vec{r}_{n0}$	position initiale du neutre
$\vec{r}_n$	vecteur déplacement
$S_0$	probabilité de réaction
$S_n$	probabilité de réaction

$t$	temps
$T_e$	température électronique
$T_g$	température des neutres
$\Delta\theta_S$	ajustement de l'angle de sortie
$\theta_n$	facteur de recouvrement d'une surface
$\theta_{n0}$	angle d'incidence initial du neutre
$\theta_S$	angle de sortie
$U_0$	énergie de liaison de surface
$v$	volume de matière retiré par neutre réactif
$V_a$	potentiel électrique flottant
$V_g$	vitesse de gravure
$V_H$	vitesse de gravure horizontale
$v_i$	vitesse de l'ion
$\vec{v}_{i0}$	vitesse initiale de l'ion
$v_n$	vitesse du neutre
$V_p$	potentiel électrique du plasma
$v_p$	vitesse de la particule p
$\vec{v}$	vitesse de la surface
$V_V$	vitesse de gravure verticale
$V_x$	vitesse de gravure dans le matériau x
$w$	largeur du profil
$x$	coordonnée horizontale de la particule
$Y$	rendement de gravure
$Y_\chi$	rendement de gravure chimique
$Y_\phi$	rendement de pulvérisation
$Y_\phi$	rendement de pulvérisation (autre notation)
$Y_{sat}$	rendement de gravure chimique assistée par les ions sur une surface saturée
$Y_{virtuel}$	rendement de gravure virtuel
$z$	nombre d'atomes par cellule

*Les savants sont des gens qui,  
sur la route des choses inconnues,  
s'embourbent un peu plus loin que les autres.*

Alphonse Karr, 1808-1890.

## REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier en premier lieu et tout particulièrement la professeure Joëlle Margot de m'avoir donné l'opportunité de préparer cette thèse sous sa direction et de m'avoir fait confiance durant ces dernières années. Merci pour son soutien et ses conseils judicieux qui ont ponctué ma recherche. Merci aussi pour m'avoir laissé une grande liberté tout au long du doctorat. Sa générosité et sa patience auront été fort appréciées.

J'exprime également ma reconnaissance à mon codirecteur de thèse, le professeur Mohamed Chaker, de même qu'aux professeurs Michel Moisan, François Vidal et Jean-Pierre Boeuf pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse et ainsi d'accorder un temps précieux à la lecture de mon manuscrit.

Je remercie le professeur Luc Stafford pour ses conseils, notre collaboration et son enthousiasme ainsi que Danièle Kéroack pour son appui logistique.

Je tiens également à remercier tous les membres du groupe de physique des plasmas pour leur sympathie, en particulier Eduardo Castaños-Martínez, Jean-Sébastien Poirier, Pierre-Marc Bérubé, Ahlem Mafoudh et Karl Giroux.

Merci également à mes parents qui m'ont permis de faire ces longues études et qui ont toujours eu confiance en moi.

Enfin, merci à Estelle de m'avoir soutenu durant ces années de doctorat et surtout d'avoir supporté mes sautes d'humeur durant ces derniers mois. Merci aussi d'avoir pris le temps de lire et relire ma thèse.



## INTRODUCTION

Les technologies de l'information font partie de notre quotidien et internet a révolutionné nos manières de communiquer et d'avoir accès à une multitude d'informations en tout lieu et en tout temps. Cet essor est directement lié à l'évolution permanente de la puissance des ordinateurs personnels ainsi que des serveurs qui doivent distribuer une quantité toujours plus importante de données. Ces performances reposent sur des capacités de stockage importantes et sur des microprocesseurs, à base de silicium, capables de traiter l'information extrêmement rapidement.

Le microprocesseur constitue le coeur de l'ordinateur. Il est constitué de transistors qui assurent le traitement de l'information binaire en jouant le rôle de commutateur électrique entre des électrodes. La rapidité croissante des microprocesseurs est directement liée à l'augmentation du nombre de transistors qu'ils contiennent. Selon la loi de Moore (Fig. 1a)), le nombre de transistors sur une puce double presque tous les 18 mois. Parallèlement, la taille des microprocesseurs diminue constamment, c'est-à-dire que la densité des transistors augmente. Aujourd'hui, il est possible d'intégrer près de 2 milliards de transistors sur une surface de quelques  $cm^2$ . Afin d'atteindre une telle densité, il est nécessaire de réduire au maximum la taille des transistors. Les technologies plasma ont joué un rôle crucial dans le développement des procédés de fabrication de tels transistors. En effet, des procédés basés sur des plasmas interviennent à différentes étapes de la microfabrication, que ce soit pour le dépôt de couches minces ou pour la reproduction de motifs de taille micro-, voire nanométriques dans des couches minces (gravure plasma).

Dans le cas spécifique de la gravure appliquée à la microélectronique, des "gallettes" (*wafers*) de silicium sont exposées au plasma. Ce dernier est à l'origine d'un flux d'ions et de neutres qui va graver la surface du silicium de manière à former des tranchées

extrêmement fines constituant la structure du microprocesseur. L'image 1b) représente une galette sur laquelle sont gravés plusieurs microprocesseurs, dont la finesse de gravure, c'est-à-dire la taille des motifs, est de 45 nm.

Aujourd'hui, les technologies de gravure par plasma débordent largement le seul cadre de la microélectronique et sont utilisées pour des applications très diversifiées notamment des dispositifs à l'échelle micro- ou nanométrique (MEMS- *MicroElectroMechanical Systems*, photonique, etc.)

Les premières expériences de gravure remontent au début des années 1970 avec la réalisation des premiers dispositifs de 10  $\mu m$  [3]. L'approche était alors totalement empirique, et la compréhension des mécanismes très limitée. Depuis, la recherche s'est accélérée et les techniques se sont perfectionnées. De nouveaux types de réacteurs ont été élaborés et les mécanismes qui entrent en jeu lors de la gravure ont été mis en évidence.

Le développement de modèles théoriques, ainsi que l'utilisation de méthodes d'analyse numérique, ont ouvert la voie à une meilleure compréhension de ces mécanismes. L'outil numérique permet en effet de simuler des concepts théoriques et de tester l'importance de divers paramètres afin de mieux cibler les expériences en laboratoire. Le développement de modèle numérique demande cependant un ajustement avec les observations expérimentales dans le but de simuler les concepts représentant le mieux la réalité. Ces ajustements une fois effectués, un simulateur devient un formidable outil de compréhension des mécanismes fondamentaux. Il peut aussi être un outil prédictif, c'est-à-dire qu'il peut servir à prévoir l'effet d'un paramètre en particulier.

En gravure, le plasma est utilisé comme une source d'ions et de neutres réactifs qui vont interagir avec une surface. Plus précisément, les ions, aidés par les neutres réactifs, vont retirer de la matière de la surface en respectant un schéma défini par un masque

qui a la particularité d'être insensible (ou à tout le moins peu sensible) à l'action des particules incidentes. Cette gravure du matériau permet de réaliser des profils à l'échelle sous-micrométrique ou nanométrique dans des matériaux variés.

Les travaux rapportés dans cette thèse s'inscrivent dans le cadre général de la compréhension des mécanismes mis en jeu dans la gravure par plasma. Nous nous efforçons, ici, de décrire et d'expliquer les différents processus qui influencent la forme des profils de gravure à l'échelle sous-micrométrique. Pour ce faire, nous avons développé un simulateur numérique bidimensionnel qui prend en compte les caractéristiques du plasma de manière à simuler l'interaction entre les particules incidentes et la surface et qui fournit une image du profil à différentes étapes de la gravure. Ce simulateur, que nous avons souhaité le plus exhaustif possible, est appliqué à la gravure de différents matériaux dans différents régimes d'interaction plasma-surface. Il a été conçu pour fonctionner sur un ordinateur PC, ce qui le rend intéressant pour des utilisateurs non expérimentés en informatique.

Cette thèse s'articule autour de quatre chapitres. Tous d'abord, nous rappelons les concepts de base en gravure par plasma ainsi que le vocabulaire utilisé. Nous présentons les différentes techniques de simulation permettant d'étudier l'évolution spatiotemporelle de profils de gravure et justifions l'approche numérique utilisée. Le chapitre 2 a pour objet de décrire d'une manière détaillée l'algorithme que nous avons développé. Dans le chapitre 3 nous présentons des résultats de simulations permettant de valider notre approche numérique. En particulier, nous examinons les liens entre les caractéristiques du plasma et la géométrie du profil obtenus en comparant les résultats simulés à des profils expérimentaux trouvés dans la littérature pour du *Si*, du *SiO<sub>2</sub>* et un oxyde complexe multicomposant (*SrTiO<sub>3</sub>*) gravés soit dans des plasmas d'argon, soit de chlore. Enfin, dans le chapitre 4, nous étudions deux mécanismes distincts, à savoir l'effet des charges électriques accumulées sur le masque et le redépôt de matière pulvérisée.

## a) CPU Transistor Counts 1971-2008 & Moore's Law

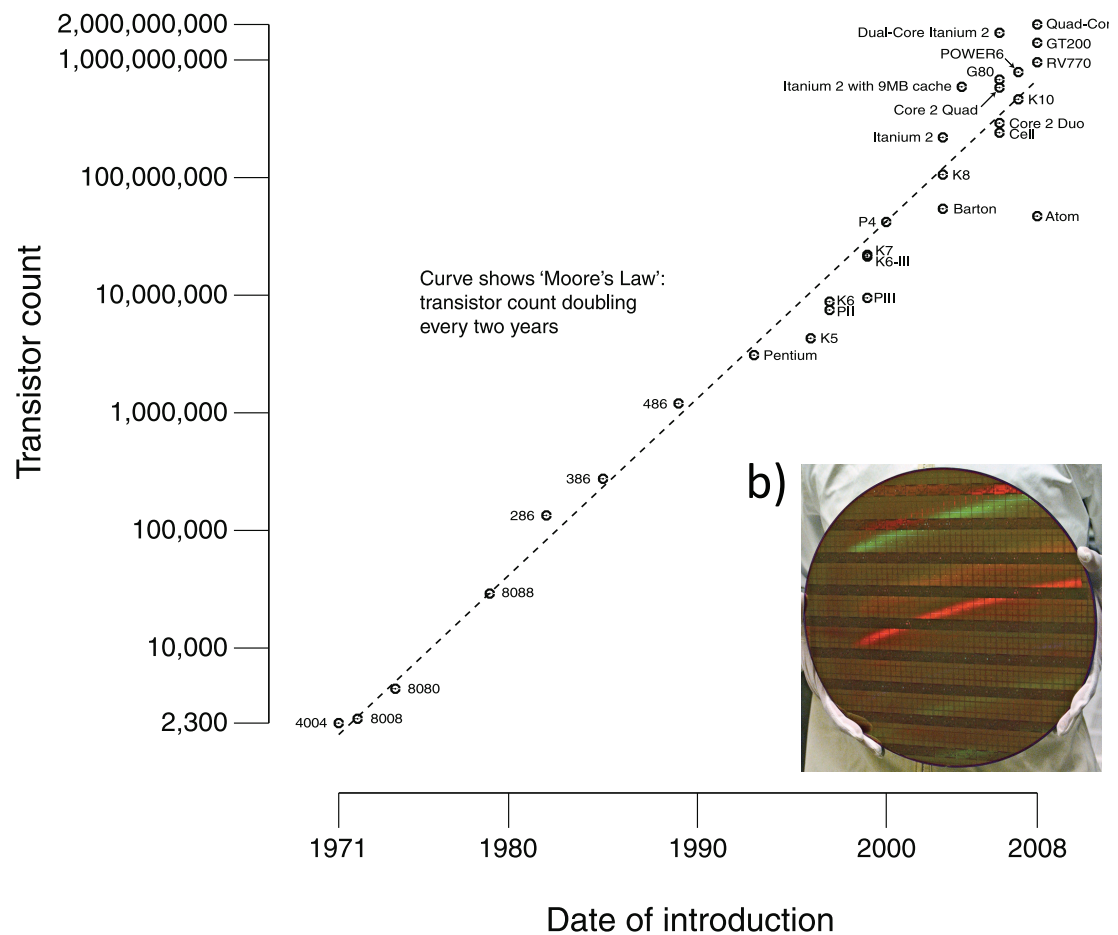


Figure 1 – *Loi de Moore et "galette" de silicium.* a) *Loi de Moore : nombre de transistors en fonction de la date d'introduction, d'après [1].* b) *Exemple de "galette" de silicium, d'après [2].*

## **CHAPITRE 1**

### **INTRODUCTION : GRAVURE PAR PLASMA ET SIMULATION DE L'ÉVOLUTION DES PROFILS**

Dans ce premier chapitre sont présentées les bases de la gravure par plasma. Le vocabulaire et les mécanismes fondamentaux qui entrent en jeu y sont succinctement présentés, et nous mettons l'accent sur l'évolution spatio-temporelle des profils de gravure. Nous précisons ici les exigences imposées par les besoins en matière de qualité des motifs. Notre but est d'en arriver, en tenant compte de ces exigences, à un simulateur prenant en compte au mieux les mécanismes physico-chimiques mis en jeu, et qui soit le plus fidèle possible à la réalité, c'est-à-dire qui soit capable de reproduire des profils expérimentaux connus et d'en prévoir l'évolution dans des conditions particulières.

Dans un premier temps, nous revenons sur la notion de plasma et sur sa place dans les technologies de fabrication de micro- et nano-structures. Nous exposons ensuite les exigences relatives à la géométrie des profils de gravure. Dans ce cadre, nous définissons notamment des termes courants comme la vitesse de gravure, l'anisotropie et la sélectivité. Nous montrons que la qualité des profils est directement liée aux caractéristiques du plasma, ces dernières définissant également les mécanismes impliqués, c'est-à-dire gravure chimique, pulvérisation ou gravure chimique assistée par les ions.

Dans un deuxième temps, nous rappelons les concepts de base associés à ces trois types de gravure. La gravure purement chimique est brièvement décrite afin de montrer ses limitations dans le contexte actuel de la micro- et nano-fabrication. Le phénomène de gaine de plasma est explicité pour mettre en avant la pulvérisation physique et la gravure chimique assistée par les ions.

En dernier lieu, nous mettons en évidence l'intérêt de la simulation pour prédire la forme des profils de gravure. Nous effectuons un état des lieux des différentes approches de modélisation possibles et nous justifions le choix de l'approche numérique utilisée.

## 1.1 La gravure par plasma

### 1.1.1 Généralités

Un plasma est un gaz partiellement ionisé, globalement neutre, dans lequel interagissent des particules via des collisions élastiques et inélastiques (recombinaison collisionnelle et ionisation, excitation). De manière générale, il est constitué de neutres dans l'état fondamental ou excités, de radicaux libres, d'ions positifs et négatifs, et d'électrons. Les atomes ou molécules excités reviennent généralement à leur état fondamental en émettant de la lumière (émission spontanée ou stimulée) ; les tubes fluorescents (appelés "néons") en sont une illustration typique. On retrouve le plasma à l'état naturel au coeur des étoiles (réaction de fusion nucléaire), dans l'ionosphère (aurores boréales), etc. On parle du quatrième état de la matière et il représente 99% de la matière visible dans l'univers.

Lorsqu'un objet (paroi, sonde, substrat) est en contact avec un plasma, la différence de vitesse de transport des électrons et des ions engendre une séparation de charges qui génère un champ électrique cherchant à rétablir l'équilibre. Il en résulte une couche de séparation entre la paroi et le plasma. Cette couche est appelée *gaine de plasma* et elle se compose essentiellement d'ions positifs, lesquels sont accélérés vers la paroi. C'est ce phénomène qui permet de bénéficier de l'effet des ions dans la gravure par plasma, tel qu'illustré par la figure 1.1. Nous y reviendrons au paragraphe 1.3.2

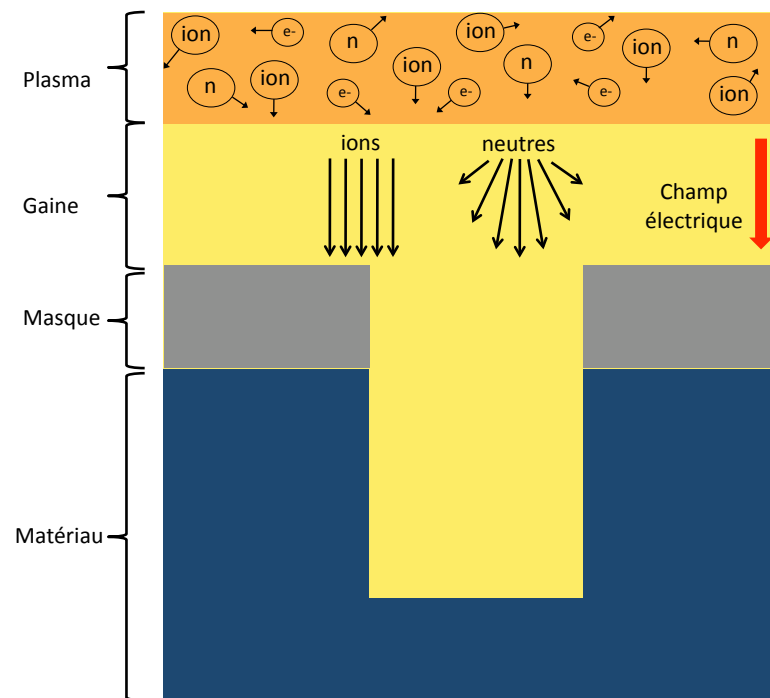


Figure 1.1 – Représentation schématique de l'ensemble plasma/gaine/masque/matériau. Dans le plasma, les collisions entre les particules se font dans toutes les directions. Dans la gaine, les ions sont accélérés par le champ électrique, ils gagnent en directionnalité et en énergie, les neutres étant distribués de façon quasi-isotrope.

Les plasmas de laboratoire sont obtenus dans des enceintes de dimensions diverses pouvant aller de quelques microns à plusieurs mètres. Ils peuvent être obtenus de différentes manières. Cependant, dans le cas de la gravure, on utilise généralement des plasmas entretenus par des hautes fréquences (domaine radio jusqu'aux micro-ondes) dans lesquels la température des électrons est très supérieure à celle des ions et des neutres. Les décharges capacitatives consistent à appliquer une tension alternative entre deux électrodes, généralement à une fréquence de 13.56 MHz. Le claquage du gaz entre les deux électrodes provoque l'ionisation : le plasma est créé et entretenu par la tension RF. Ce type de réacteur permet d'avoir des densités d'ions positifs typiques de  $10^9$  à  $10^{10} \text{ cm}^{-3}$  pour des pressions de 100 à 300 mTorr. Cependant, ces réacteurs présentent des limitations techniques pour la gravure car il est impossible de contrôler le flux et l'énergie des ions de manière indépendante.

Au début des années 90, ces limitations ont conduit à la mise au point de sources de plasmas à basse pression, typiquement de 0.1 mTorr à 15 mTorr, et haute densité ionique ( $10^{10}$  à  $10^{11} \text{ cm}^{-3}$ ). Dans ces conditions, les collisions ion-neutre près du substrat sont relativement limitées et la haute densité ionique génère un flux important, ce qui conduit à des vitesses de gravure significatives. Nous reviendrons sur ces points plus tard. Une autre particularité de ce type de plasma est que le potentiel naturel d'accélération des ions dans la gaine est faible (quelques dizaines d'eV). Pour accélérer les ions dans la gaine, on polarise le substrat de manière indépendante de la génération du plasma. Ainsi, il est possible de contrôler le flux et l'énergie des ions, ce qui est impossible avec les décharges capacitatives dans lesquelles une fraction notable de la puissance appliquée au plasma est dissipée dans les gaines.

Il existe plusieurs types de ces plasmas de haute densité, notamment les décharges RCE (Résonance Cyclotronique Électronique), les hélicons, et plus récemment les plasmas à couplage inductif (ICP) [4]. Ces plasmas diffèrent par les méthodes servant à les pro-



duire, mais leurs caractéristiques fondamentales demeurent similaires. En bref, ce type de plasma se caractérise par des rapports de flux d'ions sur flux de neutres relativement élevés et des flux d'ions relativement directionnels. Ces propriétés favorisent la gravure chimique assistée par les ions (voir paragraphe 1.3.4), ainsi que l'anisotropie (voir paragraphe 1.2) et les basses pressions limitent le redépôt de matériau sur la surface (voir paragraphe 4.3).

### **1.1.2 Utilisation de plasmas pour la reproduction de motifs dans un matériau de dimensions micro- et nanométriques**

Avant d'exposer un matériau au plasma en vue d'y reproduire des motifs, on y dépose un masque auquel on imprime la forme des motifs. Ce masque sert alors en quelque sorte de "guide" aux particules incidentes qui vont "éroder" les parties non masquées sans éroder ni endommager le masque (au moins idéalement).

Ce processus nécessite plusieurs étapes successives. En premier lieu, une couche mince du matériau à graver est déposée sur un substrat (Fig. 1.2a), puis le masque (le plus souvent une résine photosensible) est déposé par dessus (Fig. 1.2b). Vient ensuite l'étape de lithographie qui consiste à exposer la résine avec la lumière UV (photolithographie) à travers un masque prototype (Fig. 1.2c). On développe ensuite la résine (comme on le ferait pour un film en photographie), généralement avec des produits chimiques (Fig. 1.2d). Les parties de la résine qui ont été exposées aux photons UV sont alors éliminées (résines positives). Le tout est ensuite soumis au plasma (Fig. 1.2e) et le matériau exposé au plasma est progressivement enlevé. Le procédé dure aussi longtemps que désiré pour creuser dans le matériau des motifs de profondeur variable. La dernière étape consiste à retirer les résidus de résine à l'aide d'un traitement chimique ou par plasma (Fig. 1.2f). À titre d'illustration, la figure 1.2g) est une image obtenue au microscope électronique à balayage (coupe transversale) d'un profil gravé dans du silicium.

Etant donné que le masque va servir de "guide" pour la gravure, l'étape de photolithographie est cruciale. En effet, un masque présentant des parois inclinées ou des défauts importants (une rugosité excessive par exemple) peut engendrer des profils de gravure inattendus et l'évolution globale de la géométrie du profil est sensible à la forme initiale du masque.

## 1.2 Évolution des profils de gravure

Lors de la réalisation de structures à l'échelle sous-micrométrique, des difficultés apparaissent au niveau du contrôle de la géométrie du profil gravé. L'étape de photolithographie est bien sûr importante car, comme nous le verrons au chapitre 3, elle influe dès le départ sur la forme finale du profil, mais des défauts comme la formation de micro-tranchées, de parois concaves ou inclinées peuvent aussi apparaître pendant la gravure. Nous reviendrons longuement sur ces aspects dans les chapitres 3 et 4. De plus, les structures gravées sont souvent complexes, consistant en un empilement de divers matériaux comme du  $SiO_2$  déposé sur du  $Si$ , lui-même déposé sur du  $SiO_2$ . L'ensemble de ces contraintes met en exergue des impératifs en gravure par plasma :

- ◇ Un des facteurs importants est le degré d'anisotropie : il est défini par  $1 - V_H/V_V$ , où  $V_H$  est la vitesse de gravure horizontale et  $V_V$  la vitesse de gravure verticale (Fig. 1.3a). Le degré d'anisotropie est maximum pour  $V_H = 0$ . Dans plusieurs cas, on s'intéresse à la gravure de profils profonds mais étroits. On parle de profil à fort rapport d'aspect (Fig. 1.3b) et 1.3c)). Pour atteindre de tels rapports d'aspect, une vitesse horizontale nulle est idéale. Comme nous le verrons plus tard, le contrôle du redépôt des particules éjectées du matériau est également primordial. À titre indicatif, un rapport d'aspect 10 : 1 signifie que la profondeur est 10 fois plus grande que la largeur. La diminution progressive des largeurs de tranchées et l'augmentation des rapports d'aspect font que la tolérance sur la qualité des profils gravés et de plus en plus faible.

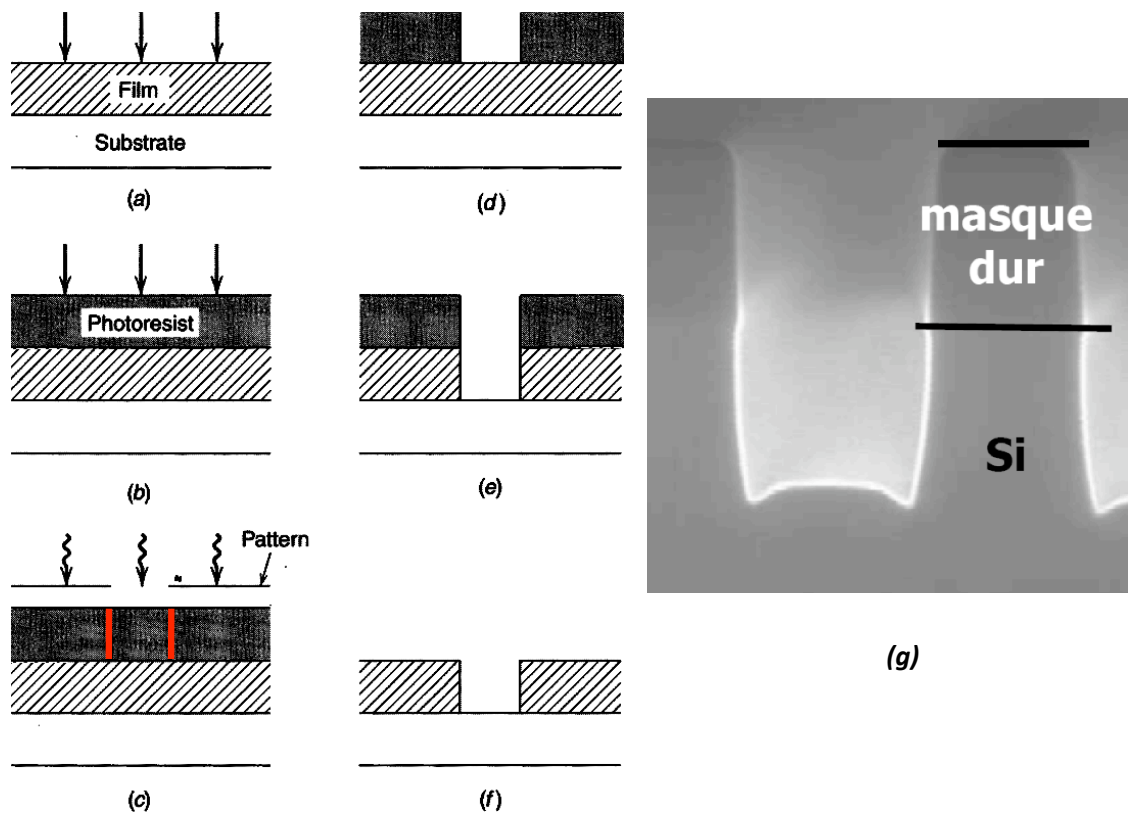


Figure 1.2 – Photolithographie et gravure. a) Dépôt du matériau. b) Dépôt de la résine photosensible. c) Application du masque et exposition au rayonnement UV. d) Développement. e) Gravure du matériau selon le masque. f) Retrait de la résine. D'après [5]. La figure g) est un exemple d'un profil de gravure dans du silicium [6].

- ◇ La sélectivité est une autre caractéristique importante : elle consiste à graver un matériau en en laissant un autre intact. Par exemple, graver du silicium tout en gardant intact un masque d'oxyde de silicium ou de résine. Souvent la géométrie du masque (photorésine ou autre matériau) influe fortement sur la forme finale du profil.
- ◇ Notons également que minimiser les défauts de gravure (rugosité excessive, dissymétrie importante, etc.) sont d'autres exigences à respecter pour assurer la fonctionnalité du futur dispositif basé sur les micro- et nano-structures.
- ◇ Enfin, pour la production de masse, la rapidité, c'est-à-dire la vitesse de gravure (ou taux de gravure, généralement exprimé en nm/mn ou Å/mn) doit être la plus élevée possible.

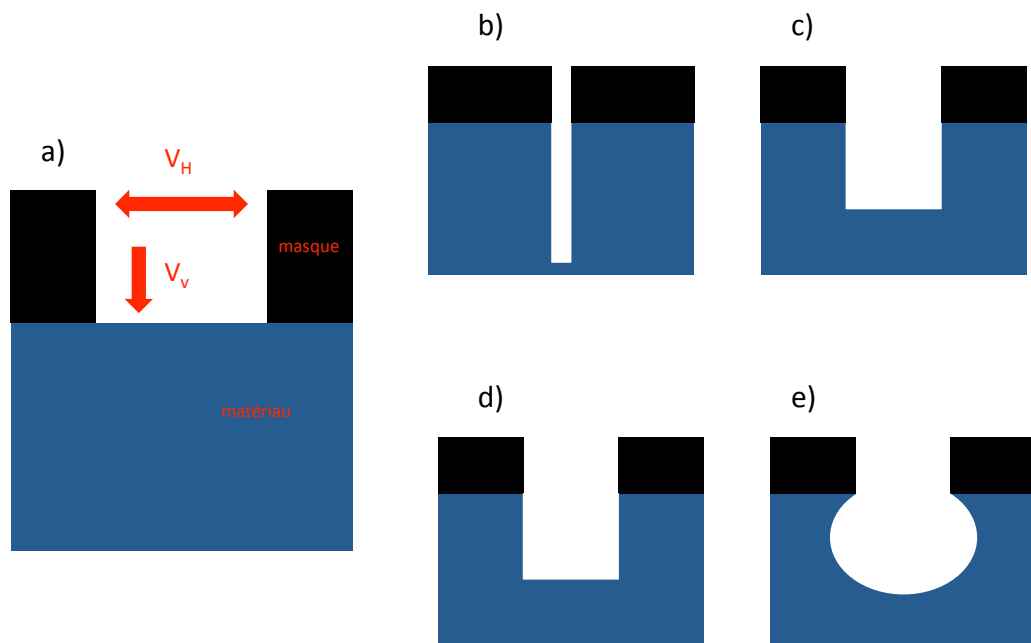


Figure 1.3 – Exemples de profils de gravure. a) Vitesses de gravure verticale ( $V_v$ ) et horizontale ( $V_h$ ). b) Profil à fort rapport d'aspect. c) Profil à faible rapport d'aspect. d) Profil anisotrope. e) Profil isotrope.

Pour obtenir des motifs de haute qualité, il est nécessaire de trouver un compromis entre sélectivité et anisotropie. Ces deux aspects peuvent être favorisés par deux mécanismes totalement opposés : la gravure purement chimique et la pulvérisation physique.

En plongeant un matériau dans une solution chimique, ou en le mettant en contact avec un gaz, on peut obtenir une gravure purement chimique. Les réactions induites entre le matériau et la solution permettent d'obtenir une bonne sélectivité, mais une très forte isotropie puisque l'érosion du matériau se fait dans toutes les directions. Cette technique n'est bien sûr pas valable pour la gravure à fort rapport d'aspect. Une gravure chimique spontanée peut aussi avoir lieu dans un plasma lorsque les espèces neutres réactives du plasma réagissent avec la surface du matériau.

Contrairement aux solutions chimiques, le plasma peut donner lieu à de la pulvérisation, ce qui consiste à arracher des atomes de la surface sous l'effet mécanique des ions. Dans ce cas, l'anisotropie peut être importante, mais la sélectivité faible selon les rendements de pulvérisation du matériau et du masque. L'anisotropie - assurée par une vitesse de gravure verticale importante - et la sélectivité sont des critères primordiaux, mais d'autres, comme la limitation des dommages sur la surface à graver sont bien sûr aussi importants. En gravure par plasma, il est également possible de tirer profit à la fois des ions et des neutres réactifs : c'est la gravure chimique assistée par les ions. Ceci permet souvent d'obtenir un bon compromis entre sélectivité et anisotropie. Cette méthode procure aussi une vitesse de gravure importante, ce qui la rend intéressante en terme de rendement.

La gravure chimique assistée par les ions n'est possible que si les caractéristiques chimiques et physiques du plasma s'y prêtent. Ainsi, dans le cas de la gravure du silicium, par exemple, un plasma d'argon n'engendre que la pulvérisation de la surface, alors qu'un plasma de chlore apporte des neutres réactifs interagissant chimiquement avec la surface de silicium, ainsi que des ions pour assurer la gravure chimique assistée par les

ions. Notons par ailleurs que les densités d'ions et de neutres sont déterminées par la pression du gaz et la puissance injectée dans le plasma et que l'énergie des ions et la pression du gaz influencent le rendement de gravure.

C'est donc l'ensemble de ces paramètres qui détermine quel mécanisme de gravure domine le procédé. Il faut aussi noter que, dans certains cas, des chimies de surface inhibitrices peuvent avoir lieu (*cf* pour gravure de *STO* dans un plasma  $SF_6/Ar$  [7]).

### 1.3 Mécanismes de gravure par plasma

Préalablement à la simulation de l'évolution des profils de gravure, nous devons conceptualiser les mécanismes de l'interaction plasma-surface. Dans ce paragraphe, nous exposons brièvement les trois mécanismes dont nous tiendrons compte dans notre simulateur.

#### 1.3.1 La gravure purement chimique ou gravure spontanée

Nous avons évoqué plus haut le cas de la gravure purement chimique. Dans ce cas, certains atomes ou molécules neutres du plasma interagissent chimiquement avec la surface. À titre d'illustration, nous traitons de la gravure du silicium par un plasma de fluor.

Dans les années 70, Coburn et Winters ont étudié les réactions à la surface du silicium en utilisant simplement un gaz, à savoir  $XeF_2$  [8] [9]. Dans ce cas, les molécules  $F_2$  du gaz subissent une adsorption dissociative sur la surface de silicium :  $(F_2)_{gaz} \rightarrow (F_2)_{ads} \rightarrow 2F_{ads}$  et les atomes de fluor se lient au silicium pour former le produit volatil :  $Si + 4F_{ads} \rightarrow (SiF_4)_{ads}$  qui est ensuite désorbé de la surface :  $(SiF_4)_{ads} \rightarrow (SiF_4)_{gaz}$ .

Plus tard, cet aspect purement chimique de la gravure a été étudié avec des plasmas [10]. Par exemple, dans un plasma de fluor, une dissociation de la molécule  $F_2$  a lieu

dans la décharge et le fluor atomique interagit directement avec la surface pour former le produit volatil. Ainsi, lors de la gravure du silicium par des neutres réactifs d'un plasma, trois étapes sont prédominantes. On a dans l'ordre :

- ◇ La chimisorption des atomes de fluor sur la surface :



- ◇ La formation du produit volatil :



- ◇ Et la désorption du produit de réaction dans le plasma :



Ces trois étapes sont indispensables pour que la gravure soit effective. Il peut arriver qu'une étape n'ait pas lieu, on parle alors d'*étape limitative*. C'est le cas, par exemple, lors de la gravure du silicium par un plasma de chlore où la deuxième étape (1.2) est limitative [10]. Il n'existe donc pas de modèle général de gravure, chaque système chimique devant être étudié au cas par cas afin de déterminer quelle en est l'étape limitative.

### 1.3.2 Formation et importance de la gaine de plasma

Comme nous l'avons évoqué plus haut, lorsqu'une surface (paroi, substrat, ...) est introduite dans un plasma, elle est soumise au flux des espèces (ions, neutres, électrons) en présence. À cause de la faible mobilité des ions, le flux de ceux-ci est beaucoup moins important que le flux des électrons. Des charges négatives s'accumulent alors à la surface du substrat qui se porte petit à petit à un potentiel électrostatique inférieur à celui du plasma. Les électrons sont alors davantage repoussés, a contrario des ions, jusqu'à

ce que les flux ionique et électronique arrivant sur la surface s'égalisent. Le potentiel correspondant dit flottant,  $V_f$ , est inférieur au potentiel plasma  $V_p$  comme illustré sur la Fig. 1.4a). Cette perturbation de potentiel au voisinage de la surface génère une zone de charge d'espace positive à cet endroit, appelée *gaine*. En réalité, le modèle de gaine pour cette zone limite entre le plasma et les surfaces en contact présente trois régions (cf Fig. 1.4b) :

- ◇ Le plasma proprement dit dans lequel la quasi-neutralité est respecté ( $n_i \approx n_e$ ) et dont le potentiel par rapport à la paroi est  $V_p$ ,
- ◇ Une zone de transition appelée *prégaine*, dans laquelle le champ électrique est faible, mais non négligeable et où les densités ionique et électronique décroissent en demeurant voisines, et enfin ;
- ◇ La gaine, dans laquelle les ions sont attirés et les électrons fortement repoussés (seuls les électrons d'énergie supérieure à  $e(V_p - V_f)$  peuvent atteindre le substrat) pour que le flux ionique soit égal au flux électronique.

La présence de la gaine est très importante en gravure par plasma, car elle est à l'origine de l'accélération naturelle des ions vers la surface du substrat. Au besoin, si cette accélération n'est pas suffisante, une polarisation externe est appliquée au plasma (auto-polarisation). Les ions accélérés sont très directionnels, ce qui représente un avantage déterminant comme nous allons le voir.

### 1.3.3 La pulvérisation

L'interaction purement mécanique entre un ion incident et la surface constitue la pulvérisation physique (ou simplement la pulvérisation). L'échange d'énergie entre l'ion incident et le matériau engendre l'éjection directe ou indirecte d'un ou plusieurs atomes. Un atome est pulvérisé si l'énergie de l'ion incident est supérieure à une certaine valeur appelée seuil de pulvérisation. Ce seuil varie typiquement d'une dizaine à quelques



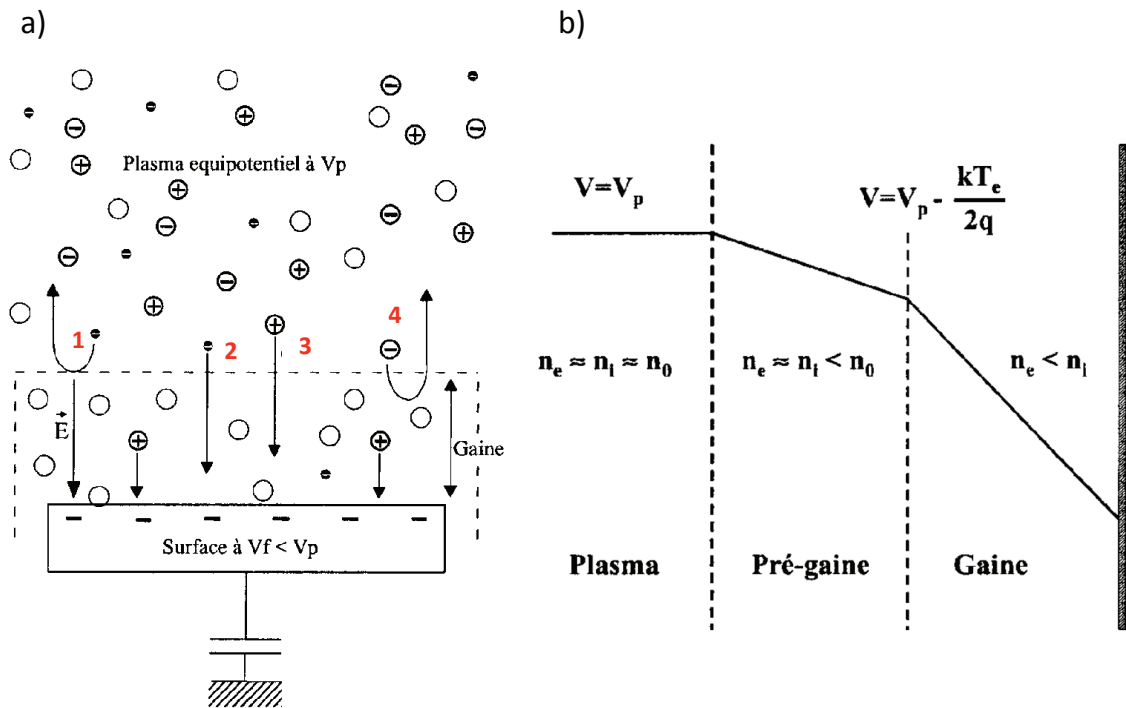


Figure 1.4 – Représentation de la gaine de plasma. a) Formation de la gaine électrostatique : 1) réflexion d'un électron lent, 2) traversée d'un électron rapide, 3) injection d'un ion positif et 4) réflexion d'un ion négatif, b) schéma de l'évolution du potentiel dans la gaine.

centaines d'eV selon le matériau et correspond à l'énergie de liaison inter-atomique. Pour des ions incidents de basse énergie (quelques centaines d'eV dans nos conditions opératoires mais  $< 1$  keV), on parle de *knock-on regime* ou régime de poussage. Dans ce cas précis, un ion incident retire directement un atome de la surface ou "pousse" un atome de surface qui va éjecter son voisin (émission secondaire). Si l'énergie est plus importante, la collision de l'ion incident avec un atome de surface engendre une cascade de collisions entre les atomes des couches inférieures jusqu'à une profondeur de l'ordre de 0.5 nm [11].

Dans un plasma, ce processus est possible puisque la décharge fournit naturellement des ions dont l'énergie cinétique peut atteindre plusieurs électron-volts, particulièrement

dans la gaine. D'un point de vue expérimental, la présence de pulvérisation est mise en évidence dans les décharges capacitives par la nette diminution de la sélectivité qui se produit lorsqu'on augmente la puissance et par conséquent l'énergie des ions bombardant le substrat.

L'érosion du matériau peut être quantifiée en définissant le rendement de pulvérisation  $Y_\varphi$ , par :

$$Y_\varphi = \frac{\text{Nombre moyen d'atomes retirés de la surface}}{\text{particule incidente}}, \quad (1.4)$$

c'est-à-dire le nombre moyen d'atomes éjectés du solide par particule incidente.

Chang *et al.* [12] ont mesuré le rendement de gravure du silicium sous l'effet du bombardement d'ions  $Ar^+$  à des énergies inférieures à 100 eV. Leurs observations sont en accord avec celles de Tachi et Okudaira [13] pour des énergies plus élevées ( $< 1\text{keV}$ ) ; le rendement de gravure par pulvérisation (à ne pas confondre avec la vitesse de gravure) varie linéairement avec la racine carrée de l'énergie de l'ion incident :

$$Y_\varphi \approx A(E_{ion}^{1/2} - E_{seuil}^{1/2}), \quad (1.5)$$

où  $Y_\varphi$  est le rendement de gravure dépendant de l'énergie,  $E_{ion}$  l'énergie de l'ion incident,  $E_{seuil}$  l'énergie du seuil de pulvérisation et A une constante dépendant du couple projectile-substrat.

D'un point de vue microscopique, plusieurs scénarii sont envisageables [14] selon l'énergie et l'angle d'incidence de l'ion :

- a) Un atome de la surface est directement éjecté lors d'une première collision (Fig. 1.5a) ;

- b) Un atome de la surface est éjecté par collision par l'atome cible (Fig. 1.5b) ;
- c) L'ion incident pénètre dans le matériau, subit des réflexions puis éjecte un atome de surface (Fig. 1.5c), ou ;
- d) L'ion pousse l'atome cible dans le matériau, lequel ressort après de multiples collisions (Fig. 1.5d).

Dans nos conditions opératoires, c'est-à-dire pour des énergies ioniques assez faibles (quelques centaines d'eV), les mécanismes a) et b) sont les plus probables.

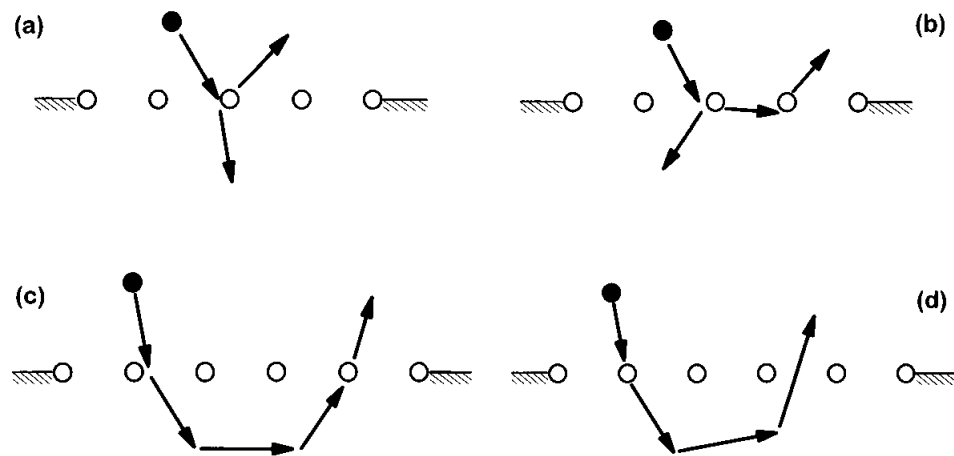


Figure 1.5 – *Différents scénarii de pulvérisation. a) Un atome de la surface est directement éjecté lors d'une première collision, b) un atome de la surface est éjecté par collision secondaire de l'atome cible, c) l'ion incident pénètre dans le matériau, subit des réflexions puis éjecte un atome de surface, ou d) l'ion pousse l'atome cible dans le matériau et celui-ci ressort après de multiples collisions [14].*

Les études expérimentales montrent que le rendement de pulvérisation dépend de nombreux paramètres comme l'énergie des ions incidents, le seuil de pulvérisation, les masses ionique et atomique, l'angle d'incidence des ions, etc. Des précisions seront apportées à ce sujet dans le chapitre 2, où nous développerons la forme analytique du rendement retenue dans notre cas.

Parmi ces paramètres, la dépendance angulaire du rendement de pulvérisation est d'une importance cruciale pour l'élaboration du simulateur, car elle a un effet direct sur la forme du profil de gravure. Il faut noter de plus que cette dépendance angulaire est fonction de la nature de l'ion incident et du matériau considéré. De nombreuses mesures du rendement de gravure en fonction de l'angle d'incidence existent. Par exemple, Chang *et al.* [15] ont mesuré le rendement de pulvérisation du silicium dans un plasma chlore/argon, Gutsche *et al.* [16] celui du platine par des ions de mercure et Vitale *et al.* [17] celui du silicium dans un plasma d'argon (Fig. 1.6).

Un autre point important à considérer est la distribution angulaire des espèces éjectées de la surface. Comme nous le verrons, ce paramètre influe également sur la géométrie du profil, plus particulièrement si on considère le redépôt du matériau pulvérisé sur les parois de la tranchée ou du masque. Nous reviendrons sur ce point dans le paragraphe 4.3.

#### **1.3.4 La gravure chimique assistée par les ions**

Dans le cadre de la gravure chimique assistée par les ions (*ion-assisted chemical etching*), la décharge fournit des neutres - qui réagissent avec la surface - ainsi que des ions énergétiques - qui aident à la désorption. Lorsque les produits de réaction sont volatils, les vitesses de gravure sont plus importantes que pour la gravure chimique simple ou la pulvérisation. On parle alors de synergie entre les neutres et les ions. Dans ce cas, la gravure est chimique et le bombardement ionique facilite la désorption des produits de

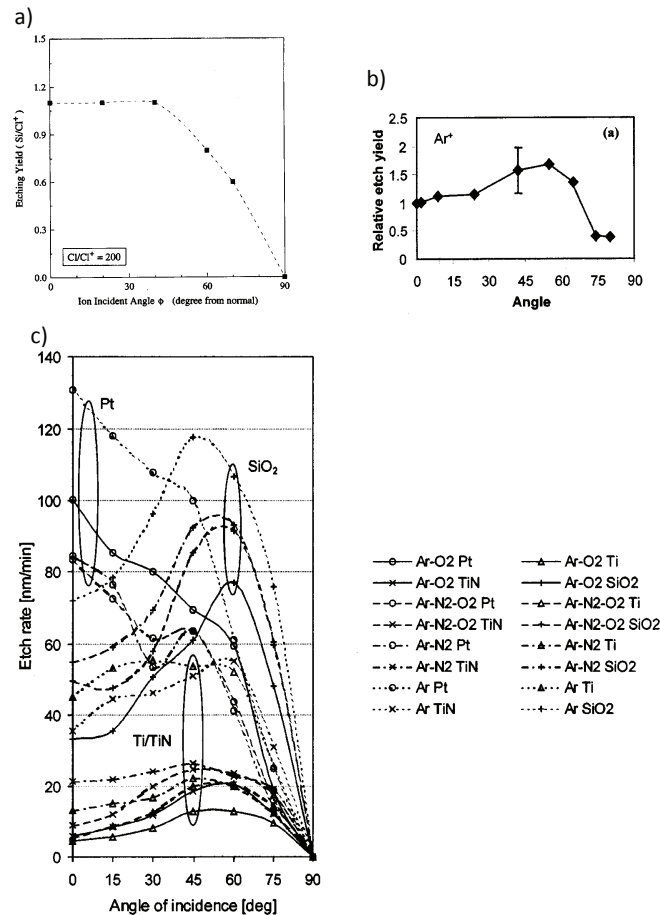


Figure 1.6 – Rendement de gravure en fonction de l'angle d'incidence de l'ion mesuré par rapport à la normale à la surface. a) Rendement de gravure du silicium par un plasma de chlore, Chang et al. [15], b) du silicium par un plasma d'argon, Vitale et al. [17], et c) de divers matériaux et divers gaz, Gutsche et al. [16].

réaction. Parfois, une distinction est faite entre la gravure chimique assistée par les ions et la gravure ionique réactive (RIE pour *Reactive Ion Etching*) pour laquelle le flux d'ions incidents réagit directement avec la surface (sans l'intervention directe des neutres). Ici, un grand nombre d'ions vont attaquer la surface et réagir directement avec elle.

Il faut noter que dans la littérature scientifique, le terme RIE est souvent ambigu. En effet, il désigne soit la gravure chimique assistée par les ions, soit la gravure ionique réactive, soit les deux à la fois. Cependant, dans la plupart des cas appelés RIE, on

considère que les neutres recouvrent la surface (complètement ou non) et que les ions délogent les composés non volatils ou faiblement volatils formés. Dans tous les cas, ces mécanismes de gravure autorisent une forte anisotropie, grâce à la forte directionnalité des ions.

Afin d'illustrer les étapes de la gravure assistée par les ions, revenons sur l'exemple précédent du silicium gravé par un plasma de fluor. L'étape (1.2) devient :



où  $J_i$  est le flux d'ions. L'étape (1.6) ainsi que la figure 1.7 schématisent l'interaction ion-neutre. Cette dernière a été mise en évidence par Coburn et Winters [18] qui ont utilisé un flux de neutres  $XeF_2$  et d'ions  $Ar^+$  pour graver du silicium.

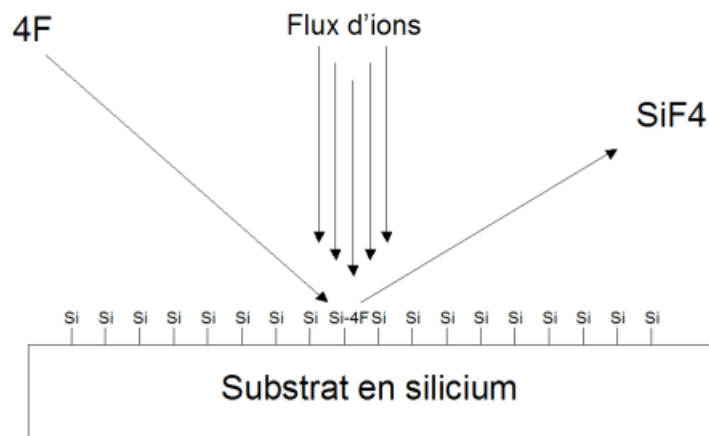


Figure 1.7 – Gravure chimique assistée par les ions. Vue schématique du flux d'ions incidents sur un substrat en silicium.

La figure 1.8 montre la vitesse de gravure avec un seul des deux flux et avec les deux ensemble ( $XeF_2$  et  $Ar^+$ ). On voit clairement que la vitesse de gravure augmente grandement quand le flux de neutres est accompagné du flux d'ions. Cette importante augmentation de la vitesse de gravure met en évidence la *synergie ion-neutre* se produisant dans ce cas (*ion-enhanced etching*). Il est cependant important de souligner que cette synergie

n'a pas toujours lieu, la chimie s'avérant parfois limitative (*ion-inhibited etching*).

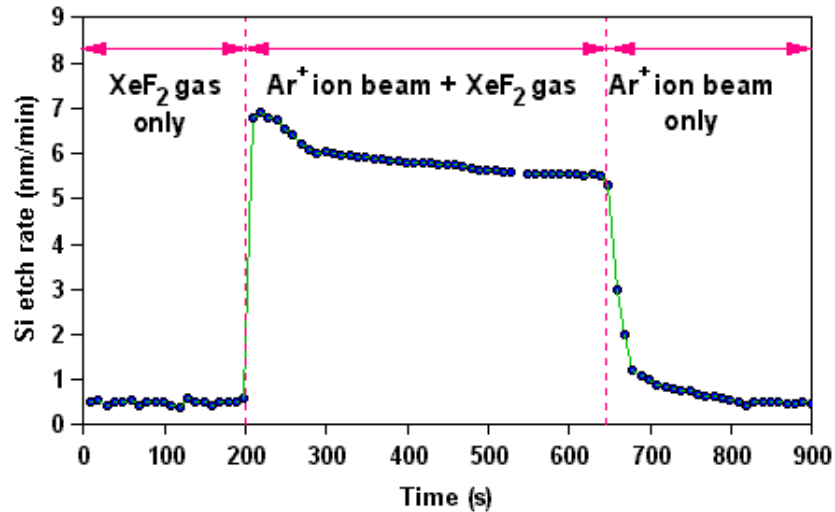


Figure 1.8 – Vitesse de gravure du Si en présence ou en absence des flux de XeF<sub>2</sub> et Ar<sup>+</sup>. La vitesse de gravure des flux combinés est plus grande que dans le cas de flux pris séparément [18].

Gottscho *et al.* [20] introduisent un taux de gravure ER (en cm<sup>3</sup>/s) mettant en évidence la synergie ion-neutre sous la forme :

$$ER = \frac{kE_i J_i}{1 + kE_i J_i / (\nu S_0 J_n)}, \quad (1.7)$$

où  $k$  est le volume de surface retiré par unité d'énergie de la particule incidente (cm<sup>3</sup>/eV),  $E_i$  l'énergie moyenne des ions (eV),  $J_i$  et  $J_n$  les flux d'ions et de neutres (cm<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup>),  $S_0$  la probabilité de réaction d'un neutre avec la surface et  $\nu$  le volume retiré par neutre actif (cm<sup>3</sup>). Dans cette équation, la synergie ion-neutre est évidente. Si le flux de neutres devient faible ( $J_n \rightarrow 0$ ), alors le taux de gravure diminue. Il en va de même pour le flux ionique ( $J_i \rightarrow 0$ ).

Il existe par ailleurs deux cas limites :

- ◇  $\nu S_0 J_n \gg kE_i J_i$ , où la surface est saturée par les neutres ; ER est alors indépendant du flux de neutres ;

◇  $vS_0J_n \ll kE_iJ_i$ , où ER ne dépend que du flux de neutres.

Une autre conséquence du bombardement ionique est l'augmentation de l'anisotropie [19]. Si  $J_n/J_i \approx 0$ , on obtient une gravure relativement verticale alors que si  $J_n/J_i \gg 1$ , la gravure est complètement dominée par les neutres et donc isotrope.

## 1.4 Simulation de profils de gravure

### 1.4.1 Un simulateur prédictif

Nous avons mis en évidence les impératifs de la réalisation de profils de gravure en accord avec les exigences actuelles en fabrication à l'échelle sous-micrométrique. Atteindre de tels objectifs demande une compréhension détaillée des phénomènes qui ont lieu lors de la gravure. Par exemple, la pression opératoire du plasma influence directement la dispersion angulaire des particules incidentes, des ions notamment. Comme le rendement de gravure dépend de l'angle d'incidence des ions, la géométrie du profil dépend donc de la pression. Si on considère le phénomène de redépôt des particules éjectées de la surface sous l'impact des ions, la pression est aussi un facteur déterminant le site de collage de ces particules. Le rapport de flux neutres/ions est directement lié aux densités de chaque espèces dans le plasma. Mais contrairement aux ions, les neutres sont très peu directionnels. Le rapport de flux va donc être déterminant pour la géométrie du profil. En outre, l'énergie des ions incidents peut dépendre de la puissance fournie au plasma ou de la tension appliquée sur le substrat. La vitesse de gravure est donc directement liée à ces paramètres.

D'un point de vue expérimental, la réalisation de profils de gravure est souvent une tâche empirique. Il s'agit à partir d'hypothèses, de faire varier les paramètres opératoires du plasma et d'observer le résultat. Il en est de même pour la simulation de profils. À partir d'un ensemble d'hypothèses, les résultats des calculs sont comparés à des profils expérimentaux, essentiellement des coupes transversales d'images réalisées au



microscope électronique à balayage. Lorsque le profil simulé représente bien le profil expérimental, la ou les hypothèses sont vérifiées. Le simulateur permet alors une compréhension fondamentale des processus qui entrent en jeu. Si les simulations sont conformes aux profils expérimentaux pour différentes conditions opératoires, le simulateur constitue un outil prédictif permettant de mieux cibler les expériences en laboratoire. Dans le meilleur des cas, on peut espérer qu'il devienne un substitut à l'expérience.

#### 1.4.2 Les différentes approches

D'une manière générale, la simulation de l'évolution du profil de gravure consiste à déterminer géométriquement l'évolution spatio-temporelle de l'interface plasma-matériau. Cette interface est une frontière qui subit des contraintes extérieures et qui se déforme au cours du temps. Les contraintes sont nombreuses, par exemple :

- ◇ Les ions qui pénètrent dans le profil et interagissent avec la surface en érodant le matériau peuvent être réfléchis et échanger leur charge avec les atomes de surface ;
- ◇ Les espèces neutres entrant en contact avec la surface peuvent engendrer une réaction chimique spontanée dont les produits volatils peuvent être désorbés par les ions incidents ;
- ◇ Les particules pulvérisées peuvent quitter le domaine de simulation pour rejoindre le plasma, revenir vers la surface du substrat ou se coller sur la surface juste après leur éjection.

L'ensemble de ces interactions physicochimiques doit être pris en compte. Simuler tous ces processus est une tâche fort difficile et il existe plusieurs techniques de représentation. Historiquement, les premières techniques (la méthode des segments, la méthode des caractéristiques et la méthode *level-set*) sont des méthodes analytiques associées à une représentation en "noeuds et segments". Puis, viennent les méthodes consistant à faire évoluer le contenu (nombre d'atomes) d'une cellule (représentant un "élément" de matière)

sous l'action d'un flux extérieur. C'est ce concept qui est utilisé dans les automates cellulaires, ainsi que pour l'approche cellulaire.

### ***Méthode des segments (string method)***

La méthode des segments [21] [22] [23] consiste à représenter l'interface plasma-matériau par des points (ou noeuds) reliés entre eux par des segments. À chaque point est attribuée une vitesse perpendiculaire à la droite entre deux segments. Le mouvement de l'ensemble des points définit l'évolution spatio-temporelle de l'interface. Cette méthode a l'avantage d'être précise : plus le nombre de points et de segments est important, plus la représentation de la surface est fine. Cependant, le choix de la règle régissant l'avancement de chaque point (reliée de près ou de loin à la vitesse de gravure) est arbitraire et peut parfois paraître totalement "artificiel". En effet, il faut connaître les composantes horizontale et verticale de la vitesse en tout point. De plus cette méthode présente des limites et devient instable pour des géométries complexes, par exemple, lorsque une superposition de points a lieu sur la surface [24] [25], comme c'est le cas pour des angles obtus.

### ***Méthode des caractéristiques (characteristic method) et Level-set method***

Ce sont des méthodes analytiques [26] [27] [28] [29]. Dans ce cas, l'interface plasma-matériau est définie par une fonction  $f$  dépendant du temps et de l'espace obéissant à l'équation différentielle :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + |\nabla f| \vec{v} \cdot \vec{n} = 0 \quad (1.8)$$

où  $\vec{n}$  est le vecteur normal à la surface et  $\vec{v}$  la vitesse de la surface. En général, la vitesse est fonction de l'énergie déposée. La méthode *Level-set* [30] est similaire, la différence résidant dans la méthode de résolution. Ces méthodes ont l'avantage d'être précises et robustes (pas de problème de noeuds), mais comme précédemment il est difficile d'intégrer

l'action physique des ions, chimique des neutres réactifs ou la prise en compte des particules redéposées sur la surface.

### ***Automates cellulaires***

Karafyllidis et Thanailakis [31] ont proposé une autre approche basée sur les automates cellulaires. Elle consiste à faire évoluer l'état d'une cellule en fonction de son voisinage. Une règle est alors imposée à chaque cellule. Dans le cas de la gravure, la règle consiste à vider le contenu de la cellule en fonction du taux de gravure (volume retiré par seconde). Cette approche est une sorte d'hybride entre les méthodes analytiques présentées plus haut et l'approche cellulaire que nous allons présenter dans le prochain paragraphe. C'est essentiellement une méthode de représentation à l'instar des points et segments pour la méthode des segments. Encore une fois, il est ici difficile d'intégrer les concepts de réaction entre les ions, les neutres réactifs, les particules redéposées et la surface. De plus, la connaissance des composantes horizontale et verticale de la vitesse de gravure est nécessaire *a priori*.

### ***Modèle cellulaire***

La simulation de profils de gravure selon l'approche cellulaire a été développée par Hoekstra *et al.* [32] [33] et a été utilisée par de nombreux auteurs [34] [35] [36] [37]. Cette approche consiste à discrétiser le domaine de simulation (vide, masque, matériau) en une grille de cellules carrées, chaque cellule contenant un nombre d'atomes selon la densité du matériau. Un état est attribué à chaque cellule (par exemple, les états cellule-matériau, cellule-interface-plasma-matériau, cellule-vide, etc.), lequel évolue en fonction du temps. Si le transport des particules dans la région de simulation (motif de gravure) est non collisionnel, alors on peut suivre les particules indépendamment les unes des autres. Une particule incidente interagit avec une cellule d'interface plasma-matériau et le nombre d'atomes dans la cellule évolue selon la nature de l'interaction : retrait d'un ou plusieurs atomes en cas de gravure, ajout en cas de redépôt. Le tirage au hasard des

particules et l'interaction aléatoire des ces dernières avec la surface sont faciles à mettre en oeuvre. Cette approche a l'avantage d'être stable et surtout de permettre l'intégration de concepts physiques réalistes comme l'interaction entre un ion ou un neutre réactif et un atome de surface, le collage d'une particule neutre non réactive sur la surface affectés de probabilités relatives à ces mécanismes.

## **1.5 Conclusion**

Ce chapitre nous a permis d'introduire les concepts fondamentaux et le vocabulaire propre à la gravure par plasma. Nous avons par la suite mis en évidence l'intérêt de la modélisation et des simulations de la gravure par plasma. Parmi les méthodes permettant de simuler l'évolution de profils de gravure, nous avons adopté la méthode cellulaire pour sa mise en oeuvre logique et réaliste. La description de cette méthode et son algorithme sont présentés en détail dans le chapitre suivant.

## CHAPITRE 2

### PRÉSENTATION DU SIMULATEUR

Ce chapitre est consacré à la présentation détaillée du simulateur. L'algorithme réalisé y est présenté étape par étape, tout en gardant à l'esprit les liens avec les concepts physiques sous-jacents. Ces quelques pages résument l'étape de développement du code qui constitue néanmoins le plus gros investissement en terme de temps.

En premier lieu, le simulateur est présenté dans sa globalité. Nous justifions le choix de traiter les particules incidentes indépendamment les unes des autres. Puis, nous introduisons le vocabulaire propre à l'approche cellulaire, ainsi que les fonctions utilisées et nous expliquons plus particulièrement le concept d'*état* de cellule. Nous précisons par la suite les deux mécanismes d'évolution de l'état des cellules, à savoir le rôle du voisinage et de l'interaction avec les particules incidentes via le rendement de gravure. Ce dernier est ensuite détaillé, puis nous présentons sa forme analytique utilisée et nous montrons comment l'incidence des ions est prise en compte. Les flux d'ions et de neutres, ainsi que leurs position et vitesse initiales conditionnent la forme du profil de gravure. Nous présentons donc en détail ces paramètres et les fonctions numériques utilisées. Nous montrons également, comment, d'un point de vue algorithmique, est traitée l'accumulation de charges électriques sur la surface du masque, et en quoi la trajectoire des ions en est affectée. De plus, des précisions sont apportées sur la méthode utilisée pour traiter le redépôt des particules pulvérisées. Enfin, un schéma de synthèse résume l'algorithme dans son ensemble, depuis les caractéristiques du plasma jusqu'à l'image finale du profil.

## 2.1 Fonctionnement général

Le programme a été élaboré en langage C, qui offre une bonne gestion de la mémoire et qui permet d'utiliser des *structures*<sup>1</sup> pour un stockage aisé de données nombreuses et de natures différentes (entiers, doubles, chaîne de caractères et tableaux). L'avantage majeur de ce langage est qu'il est associé à de nombreuses bibliothèques et fonctions. Pour créer les images du profil gravé à des instants successifs du processus, nous utilisons des bibliothèques spécifiques [38] [39]. De même, pour traiter les aspects aléatoires et les distributions des particules, nous utilisons des fonctions existantes issues du *Numerical Recipes in C* [40].

L'ensemble gaine/masque/matériau constitue le domaine de simulation à deux dimensions utilisé. L'algorithme repose sur une discrétisation de ce domaine en une grille cartésienne de cellules carrées (Fig. 2.1). La taille du domaine est choisie par l'utilisateur en définissant la taille des cellules et leur nombre.

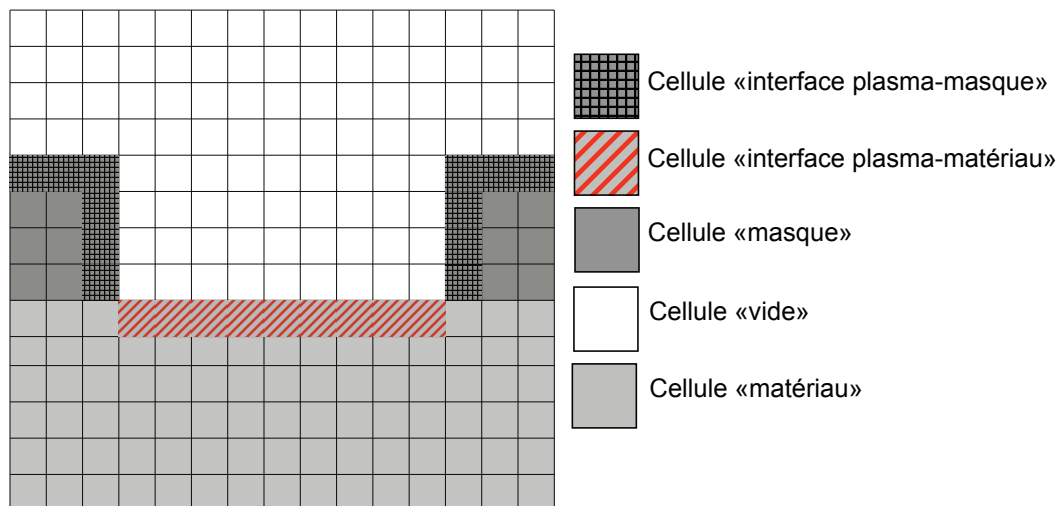


Figure 2.1 – *Domaine de simulation discrétisé : grille de cellules carrées associées à un état : "vide", "matériau", "masque", "interface plasma-masque" ou "interface plasma-matériau"*

<sup>1</sup>Une structure est similaire à l'objet en C++.

Tout d'abord, nous calculons le nombre de particules incidentes provenant du plasma. Ce calcul est fait à partir des flux incidents de neutres et d'ions, de la taille du domaine et d'un pas de temps  $dt$  adaptable. La valeur de  $dt$  est choisie de manière à obtenir un nombre de particules suffisamment grand pour assurer une bonne statistique, mais raisonnablement petit afin de ne pas saturer la mémoire de l'ordinateur. En effet, nous avons fait en sorte que ce simulateur puisse fonctionner sur un simple PC. Typiquement, dans nos simulations,  $dt = 1, 0.1$  ou  $0.01s$  selon le nombre de particules incidentes.

Les ions et les neutres partent du haut du domaine de simulation au-dessus duquel se trouve le plasma et progressent pas à pas vers la surface. Chaque particule est traitée indépendamment des autres, ce qui signifie que l'on néglige les collisions entre elles. Ceci est une approximation raisonnable dans notre cas puisque nous nous intéressons à la gravure par plasma à basse pression (0.1 - 10 mTorr). Dans ce type de plasma, le libre parcours moyen des ions et des neutres, c'est-à-dire la distance moyenne parcourue par une particule entre deux collisions, est de l'ordre du millimètre, voire du centimètre. Or, les dimensions des profils de gravure sont généralement inférieures au micromètre.

Le domaine de simulation est discrétisé en cellules carrées dont chacune est caractérisée par divers paramètres stockés dans une *structure*. Ces paramètres sont : la dimension de la cellule  $a$ , ses coordonnées dans la grille, le nombre d'atomes qu'elle contient, son éventuelle charge électrique et son état. Le nombre d'atomes dans chaque cellule est déterminé par sa dimension et la densité du matériau. Typiquement, dans le cas du silicium (densité du matériau  $5.10^{22}cm^{-3}$ ), une cellule de 10 nm de côté contient environ 66000 atomes. Un état est initialement attribué à chaque cellule : "vide", "matériau", "masque", "interface plasma-masque" ou "interface plasma-matériau". L'état "vide" correspond au plasma ou à la gaine. Dans certaines circonstances, comme nous le verrons plus tard, on peut considérer que le flux d'ions engendre une accumulation de charges électriques sur la surface du masque. Dans ce cas, on attribue aux cellules d'interface

un état supplémentaire. Ainsi les états "interface plasma-masque" et "interface plasma-matériau" peuvent être combinés avec les états "chargé" et "non chargé". L'état de chaque cellule évolue dans le temps et lorsque le matériau est gravé, une ou plusieurs cellules passent de l'état "interface plasma-matériau" à l'état "vide". L'évolution globale de ces cellules conduit à un profil de gravure.

Pour chaque simulation, de nombreuses données d'entrée sont considérées. Pour caractériser les cellules, il faut en effet connaître la densité du matériau et celle du masque, la dimension et le nombre de cellules, ces deux derniers paramètres définissant la dimension du domaine de simulation. D'autres données sont reliées au plasma, comme sa densité de neutres et d'ions, ce qui permet de calculer les flux incidents. D'autres paramètres sont aussi nécessaires pour déterminer les rendements de réaction comme l'énergie des ions, les probabilités de réaction entre les neutres et le matériau, la masse des particules incidentes, etc. La figure 2.2 schématise le fonctionnement du code. Lorsqu'il est disponible dans la littérature, le rendement de gravure n'est pas calculé, mais simplement utilisé comme entrée.

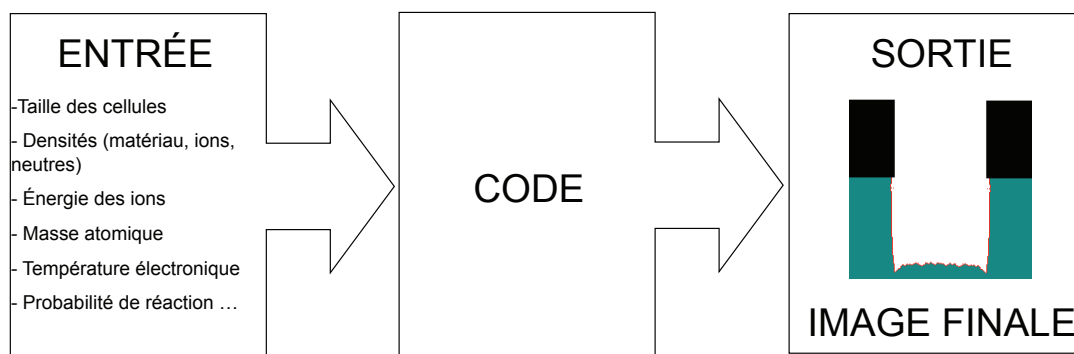


Figure 2.2 – Schéma du code : plusieurs paramètres d'entrée sont utilisés pour le calcul des flux, des rendements de gravure, etc. En sortie, on obtient une image au format PNG du profil gravé.

À de nombreuses étapes de l'algorithme, les méthodes dites de Monte-Carlo sont utilisées. Il s'agit en fait d'utiliser des concepts aléatoires pour simuler, par exemple, les in-



teractions entre les particules et la surface. Ce concept de "tirage au hasard" est notamment utilisé pour décrire le mouvement des particules. Plus particulièrement, le choix des particules est aléatoire (ion ou neutre) et le choix de leur position et de leur vitesse initiale est aussi aléatoire. La vitesse de chaque particule est choisie au hasard à partir d'une distribution angulaire en cosinus pour les neutres et Gaussienne pour les ions. Comme nous l'avons déjà dit, dans le domaine de simulation, les collisions sont négligées de sorte que les particules incidentes sont indépendantes les unes des autres. L'algorithme va alors "suivre" une particule après l'autre, depuis son injection dans le domaine de simulation, jusqu'à son interaction avec la surface. La trajectoire de chaque particule est déterminée en fonction de son angle initial, de sa position initiale à l'entrée du domaine, de sa vitesse initiale, du champ électrique induit par la différence de potentiel appliquée au substrat, et éventuellement du champ électrique créé par l'accumulation de charges sur le masque.

Chaque ion suit une trajectoire parabolique depuis son entrée dans le domaine de simulation. Lorsqu'il arrive sur la surface du masque ou du matériau, il va interagir avec elle. S'il arrive sur la surface avec une incidence rasante (c'est-à-dire, avec un angle important par rapport à la normale à la surface), il va retirer une faible quantité d'atomes de surface (car, comme nous le verrons, le rendement de gravure est faible à incidence rasante), puis être réfléchi tout en conservant une grande partie de son énergie. Si l'angle d'incidence est proche de la normale, l'ion va pulvériser une plus grande quantité d'atomes de la surface, et perdre toute son énergie durant cette interaction. Enfin, chaque neutre suit une trajectoire rectiligne. Lorsqu'un neutre réactif arrive sur une surface, il va réagir chimiquement avec cette surface pour former un composé volatil et retirer une certaine quantité d'atomes en fonction du rendement de gravure chimique, cette interaction étant indépendante de son angle d'incidence.

La surface est constituée de cellules contenant une quantité initiale d'atomes qui va évoluer sous l'effet des particules incidentes. La quantité d'atomes retirée dépend du

rendement de gravure. Lorsque le nombre d'atomes dans une cellule est inférieur à un certain seuil, la cellule est considérée comme gravée, elle passe dans l'état "vide".

Globalement, le simulateur consiste donc en une transformation de l'état des cellules sous la contrainte des particules incidentes. La mise à jour régulière des états fournit une image du profil à chaque instant, ce qui permet de suivre son évolution temporelle.

## 2.2 État des cellules

Le domaine de simulation est initialement défini par l'utilisateur : vide, masque et matériau. La géométrie du domaine dépend de la dimension des cellules et de leur état, ainsi que du nombre de cellules horizontales et verticales. L'épaisseur du masque, la largeur et la profondeur maximale de la tranchée, ainsi que la pente de la paroi du masque sont choisies par l'utilisateur, la pente du masque étant généralement de quelques degrés par rapport à la verticale.

La première étape de l'algorithme consiste à identifier les cellules de surface, c'est-à-dire celle étant dans l'état "interface plasma-matériau" et "interface plasma-masque". C'est la phase d'initialisation, chaque cellule étant numérotée en fonction de sa coordonnée dans la grille. Un balayage de l'ensemble des cellules de la grille permet d'enregistrer leur état. Dès qu'une cellule "matériau" est repérée, une analyse de l'état de ses voisines est effectuée. Si elle est adjacente à au moins une cellule "vide", son état devient automatiquement "interface plasma-matériau". De même, si une cellule dans l'état "masque" est adjacente à une cellule dans l'état "vide", son état devient "interface plasma-masque". Pour réaliser cette identification, on considère le voisinage de Von Neuman, c'est-à-dire que l'on relève l'état des cellules situées immédiatement au-dessus, en-dessous, à droite et à gauche. Tel qu'illustré par la figure 2.3, pour un total de  $N \times N$  cellules, la cellule  $Q$  devient une cellule de surface si au moins une des cellules

voisines  $Q - 1$ ,  $Q + N$ ,  $Q + 1$  ou  $Q - N$  est dans l'état "vide".

$Q-N+1$	$Q+1$	$Q+N+1$
$Q-N$	$Q$	$Q+N$
$Q-N-1$	$Q-1$	$Q+N-1$

Figure 2.3 – *Voisinage de la cellule  $Q$  pour un domaine de simulation de  $N$  cellules horizontales et  $N$  cellules verticales.*

Une fois le domaine initialisé, l'état des cellules va évoluer. Il y a deux façons de changer l'état des cellules : la première résulte de l'interaction entre une cellule et des particules, la deuxième est liée au voisinage de chaque cellule. Dans le premier cas, l'état d'une cellule évolue dans le temps sous l'action des particules incidentes. Par exemple, elle passe de l'état "interface plasma-matériau" à "vide" si suffisamment d'atomes ont été retirés sous l'effet du bombardement ionique. Lorsque 95% des atomes d'une cellule ont été retirés, elle devient "vide". Cette valeur est choisie de manière à éviter le retrait de plus d'atomes que ce qu'en contient la cellule, les 5% restant étant équitablement distribués aux cellules voisines. La valeur exacte du pourcentage d'atomes retirés a peu d'influence sur le résultat final. Dans le second cas, l'état évolue en fonction du voisinage. Par exemple, pour une cellule A dans l'état "matériau" est en contact avec une cellule B "interface plasma-matériau", si B devient "vide" alors A devient automatiquement "interface plasma-matériau". La figure 2.4 schématise l'évolution de l'état des cellules.

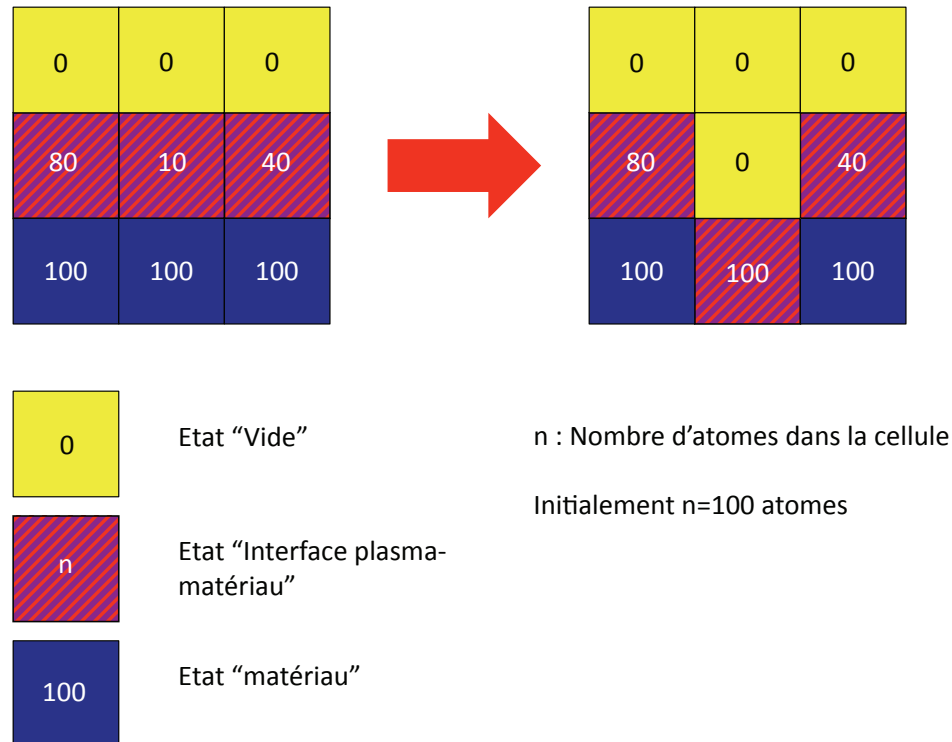


Figure 2.4 – Illustration du changement d'état : initialement chaque cellule contient  $n$  atomes (ici 100), ce nombre évolue sous l'effet de l'interaction avec le plasma. Les cellules "interface plasma-matériau" contiennent ici 80, 10 et 40 atomes. La cellule du milieu passe de 10 à 0 atomes, elle change d'état et devient "vide", par conséquent la cellule du bas devient "interface plasma-matériau"

## 2.3 Rendement de gravure

### 2.3.1 Forme analytique du rendement

L'évolution de l'ensemble des cellules est donc liée à l'interaction entre ces dernières et les particules incidentes provenant du plasma. Lorsqu'une particule arrive sur la surface, elle va soit directement retirer de la matière (pulvérisation), soit réagir chimiquement pour former un produit volatil (gravure spontanée), soit former un composé faiblement volatil désorbé par un ion (gravure chimique assistée par les ions). C'est le rendement de gravure qui conditionne cette interaction. Comme mentionné au cha-

pitre précédent, les caractéristiques du plasma définissent la valeur du rendement de gravure. Lorsque les données du plasma et du matériau sont connues, le rendement de pulvérisation et/ou de gravure chimique assistée par les ions est défini par un modèle. Nous avons choisi celui élaboré dans [41] et [42] qui est bien détaillé et s'applique à diverses combinaisons plasma-matériaux. Dans ce modèle, la vitesse de gravure est définie par deux composantes, la vitesse de gravure chimique  $ER_\chi$  et celle de gravure purement physique (*i.e.* la pulvérisation)  $ER_\phi$ . Dans ces conditions, la vitesse de gravure totale est donnée par :

$$ER_t = ER_\chi + ER_\phi = \frac{k_n + J_i Y_{sat}}{N_t} \theta_n + \frac{J_i Y_\phi}{N_t} (1 - \theta_n) \quad (2.1)$$

où  $\theta_n = [1 + \beta J_i Y_{sat} / S_n J_n]^{-1}$  est le facteur de recouvrement de la surface par les espèces neutres actives,  $k_n$  le taux de désorption spontanée,  $Y_{sat}$  le rendement de gravure chimique assistée par les ions sur une surface saturée,  $N_t$  la densité du matériau,  $Y_\phi$  le rendement de pulvérisation,  $J_i$  le flux d'ions incidents,  $J_n$  le flux de neutres,  $S_n$  la probabilité de réaction, et  $\beta$  le nombre d'atomes réactifs désorbés par produit de réaction. Le paramètre  $Y_\phi$  est défini par [7] :

$$Y_\phi = 0.163 \alpha \frac{\Gamma^{3/4}}{U_0^{1/2}} \left( 1 - \sqrt{\frac{E_{seuil}}{E_i}} \right) \quad (2.2)$$

où  $\alpha$  est un facteur sans dimension,  $\Gamma$  le facteur de transfert d'énergie pour les collisions élastiques,  $U_0$  l'énergie de liaison de surface,  $E_i$  l'énergie des ions, et  $E_{seuil}$  l'énergie seuil de pulvérisation.

Lorsque le produit de réaction est non volatil ( $k_n = 0$ ), on a :

$$\begin{aligned} ER_\chi &= \frac{J_i Y_{sat}}{N_t} \theta_n = Y_\chi \frac{J_i}{N_t} \\ ER_\phi &= Y'_\phi \frac{J_i}{N_t} \end{aligned} \quad (2.3)$$

où  $Y_\chi$  est le rendement de gravure chimique et  $Y'_\phi = Y_\phi(1 - \theta_n)$ .

Le rendement de gravure total peut donc être représenté comme une combinaison du rendement de pulvérisation et du rendement de gravure chimique assistée par les ions :

$$Y = Y'_\phi + Y_\chi.$$

D'un point de vue algorithmique, nous utilisons un rendement de gravure "virtuel". En effet, le nombre d'atomes par cellule peut être important (plus de 10000) et le rendement de gravure peut être faible (de l'ordre de l'unité ou inférieur), ce qui implique qu'il faut un grand nombre de particules incidentes pour retirer 95% du contenu d'une cellule. Nous multiplions alors le rendement par un facteur tel que le rendement "virtuel" ainsi obtenu soit suffisamment important pour "vider" une cellule dans un délai raisonnable. Globalement, le temps de calcul est largement diminué. Cependant, le choix du facteur multiplicatif n'est pas arbitraire. En effet, un rendement "virtuel" trop important engendre des profils non réalistes. Par exemple, considérons une cellule cible du matériau contenant 100 atomes, et un rendement de gravure  $Y$  de 1 atome par ion incident. Pour que la cellule cible passe de l'état "interface plasma-matériau" à l'état "vide", il faut lui retirer 95 atomes. Avec un tel rendement, il faut 95 ions incidents pour y parvenir. Si on multiplie le rendement  $Y$  par le facteur  $acc = 10$ , le rendement "virtuel" est  $Y_{virtuel} = acc \times Y$ , soit 10 atomes par ion incident. Dans ce cas, il ne nous faut plus que 9.5, soit 10 ions incidents pour "vider" la cellule cible. Ainsi, on a divisé par 10 le temps de calcul. D'autre part, si le facteur accélérateur est trop important, par exemple, si  $acc = 100$ , un seul ion incident est suffisant pour "vider" la cellule cible. Ce cas de figure n'est pas valable. En effet, dans la réalité, un grand nombre d'ions est

nécessaire pour graver le volume représenté par une cellule. Comme chaque ion n'interagit pas de la même manière avec la surface (son interaction dépend notamment de son angle d'incidence), c'est alors un ensemble d'ions aux caractéristiques variées qui est nécessaire pour "vider" la cellule cible. Il y a donc une limite minimale au nombre d'ions nécessaires pour "vider" la cellule. Cette contrainte nous impose d'ajuster le facteur  $acc$  de manière convenable. Pour ce faire, on utilise le rapport  $r = (\text{nombre initial d'atomes par cellule}) / (Y_{virtuel})$ . La figure 2.5 représente, au même instant, deux surfaces gravées pour deux valeurs de  $r$ . Sur la figure 2.5a),  $r = 1$ , c'est-à-dire qu'un seul atome est nécessaire pour "vider" une cellule : la surface présente une rugosité anormale. Sur la figure 2.5b),  $r = 10$  : la surface est beaucoup plus lisse. Les simulations montrent que la rugosité de la surface n'évolue plus pour  $r > 10$  et qu'un  $r$  compris entre 5 et 10 est le meilleur compromis entre un temps de calcul raisonnable et une rugosité réaliste.

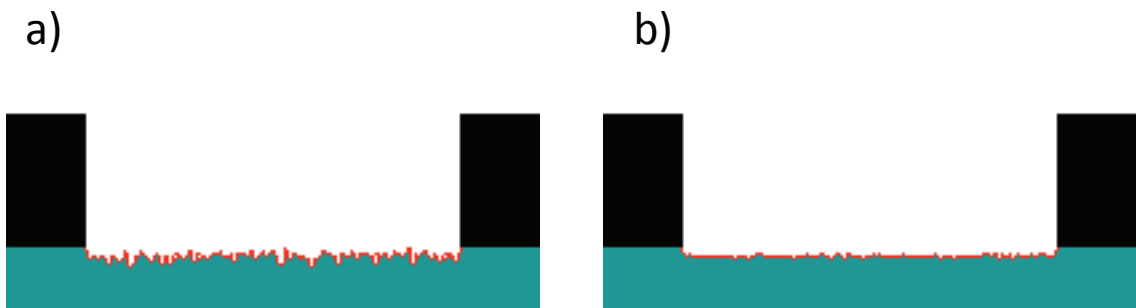


Figure 2.5 – Impact du rendement "virtuel" sur la rugosité de la surface. Sur la figure a), la surface présente une rugosité anormale, le facteur  $r = 1$  n'est pas raisonnable. Sur la figure b),  $r = 10$ , il faut ici 10 ions incidents pour "vider" une cellule. Dans ce cas, la surface est lisse.

### 2.3.2 Dépendance angulaire du rendement de gravure

Comme nous l'avons vu au chapitre précédent, le rendement de gravure dépend de l'angle d'incidence de l'ion par rapport à la surface du matériau, l'angle de référence étant mesuré par rapport à la normale à la surface (Fig. 2.6). En général, le rendement est plus important pour des incidences voisines de la normale et diminue lorsque l'angle augmente. Cette dépendance a un effet direct sur la géométrie du profil gravé.

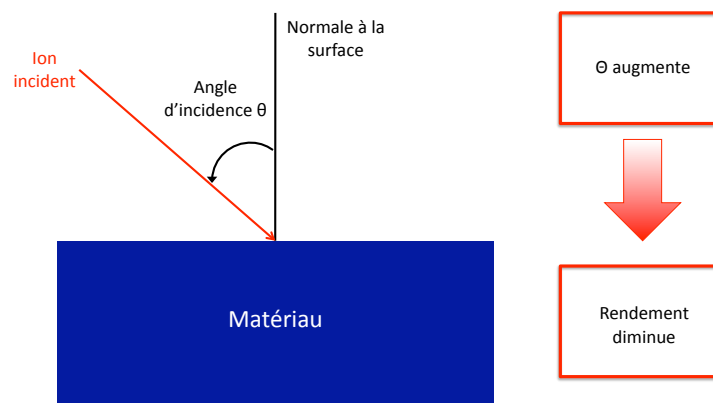


Figure 2.6 – Définition de l'angle d'incidence.

Ce paramètre est pris en compte dans notre algorithme, et nous l'adaptions aux conditions opératoires envisagées. Plus précisément, lorsqu'un ion arrive sur une cellule cible, on calcule la normale locale sur cette cellule (en fonction de son voisinage). L'angle d'incidence est comparé à cette normale et le rendement de gravure est pondéré par un coefficient. Ce coefficient est le rendement relatif, dont le maximum vaut 1 et qui dépend de l'angle d'incidence de l'ion. Ce rendement relatif dépend quant à lui, du matériau et de la nature de l'ion incident. La forme des rendements relatifs utilisés est illustrée dans la figure 2.7.



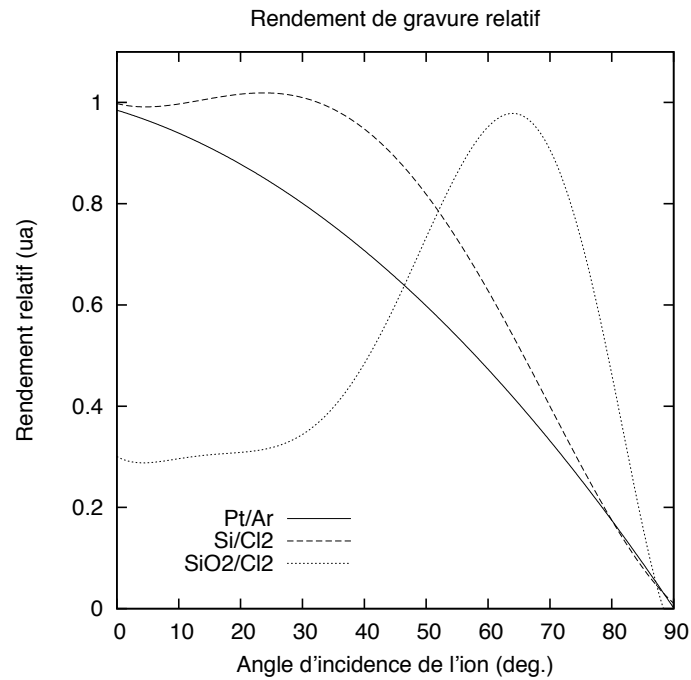


Figure 2.7 – Rendements de gravure relatifs en fonction de l'angle d'incidence des ions pour du platine, du silicium et de l'oxyde de silicium dans des plasmas d'argon et de chlore [12] [15] [16].

En amont de cette relation entre le rendement de gravure et l'angle d'incidence, c'est la distribution angulaire des particules, et plus particulièrement celle des ions, qui devient un paramètre primordial. Une dispersion angulaire importante engendre un impact des ions non perpendiculaires à la surface et inversement. Ainsi, la géométrie du profil de gravure sera intimement liée à cette distribution via la dépendance angulaire du rendement de gravure.

Dans les chapitres suivants, nous illustrerons l'effet de cette dépendance angulaire dans des conditions opératoires bien précises.

## 2.4 Traitement des particules incidentes

### 2.4.1 Nombre d'ions, de neutres et distribution angulaire

Dans toute simulation, nous devons déterminer le nombre d'ions et de neutres qui vont être traités. Ce nombre de particules incidentes doit être suffisamment grand afin d'assurer une bonne statistique, mais pas trop non plus afin de limiter le temps de calcul et surtout l'utilisation de la mémoire. La fonction de tirage aléatoire utilisée (*ran2*, du *Numerical Recipes in C* [40]) offre une bonne statistique à partir de 10000 tirages (Fig. 2.8). Nous utilisons jusqu'à  $10^6$  particules, ce qui représente environ 100 Mo de mémoire utilisée. Le choix du nombre de particules se fait en fonction du flux calculé venant du plasma et du pas de temps  $dt$ . On considère  $N^2$  cellules. Le nombre d'ions incidents est  $N_i = n_i dt$ , où  $n_i$  est le nombre d'ions incidents par unité de temps. Quant à  $n_i$ , il est défini par  $n_i = waJ_i = Na^2 n_{ip} v_i$  où  $w = Na$  est la largeur du profil,  $a$  la dimension de la cellule,  $J_i$  le flux d'ions,  $n_{ip}$  la densité ionique du plasma et  $v_i = \sqrt{k_B T_e / m_i}$  la vitesse de l'ion incident avec  $k_B$  la constante de Boltzmann,  $m_i$  la masse de l'ion, et  $T_e$  la température électronique. De la même façon que pour les ions, le nombre d'espèces neutres est  $n_n = Na^2 n_{np} (v_n / 4)$  où  $n_{np}$  et  $v_n$  sont la densité et la vitesse des neutres du plasma, le nombre d'atomes par cellule  $N_a$  étant calculé à partir de la densité du matériau  $N_t$  :  $N_a = a^3 N_t$ .

L'angle d'incidence et la position initiale des particules sont aussi choisis à l'aide de la fonction *ran2*. Pour les neutres, l'angle d'incidence est déterminé à partir d'une distribution en cosinus, et pour les ions on utilise une distribution Gaussienne (fonction *gasdev* du *Numerical Recipes in C* utilisant la méthode de *Box-Muller* - cf Annexe I). Pour une distribution angulaire Gaussienne, sa largeur à mi-hauteur (LMH) est directement liée aux collisions dans la gaine de plasma. La LMH augmente avec le nombre de collisions. Cette valeur est un paramètre d'entrée dans nos simulations et nous y reviendrons plus en détails dans le chapitre suivant.

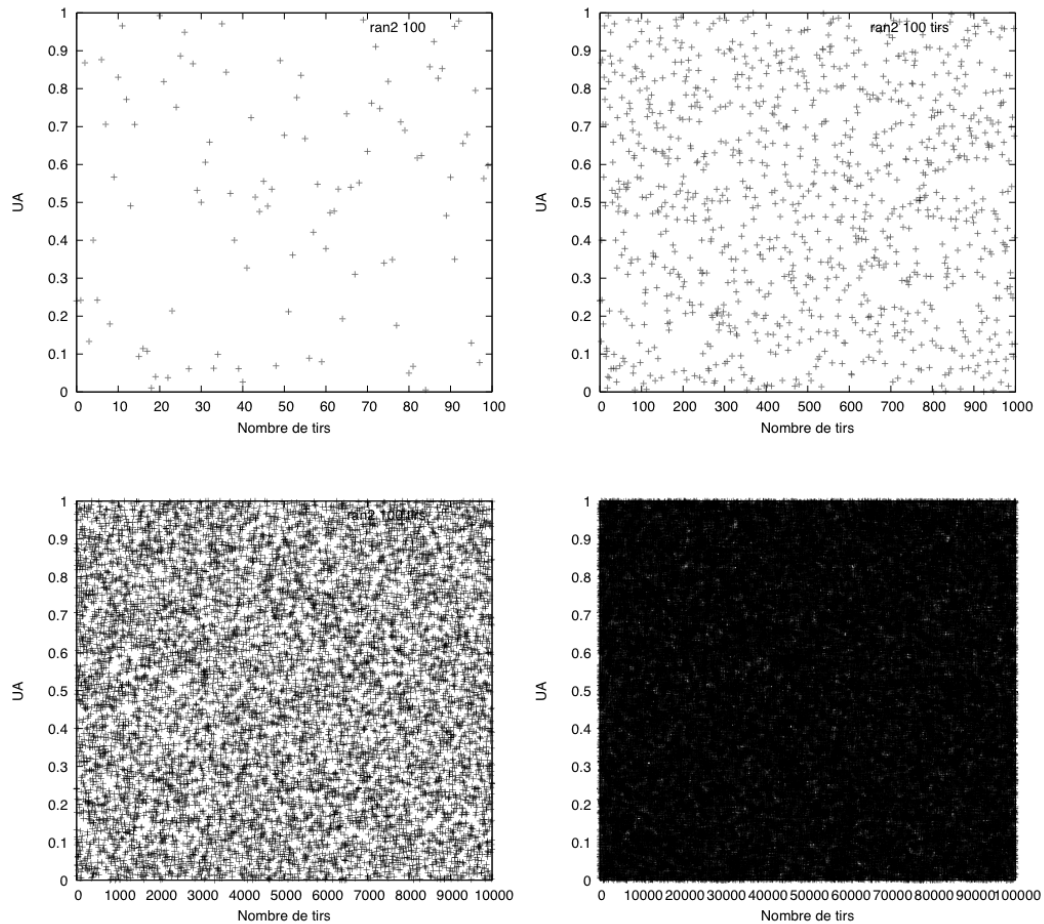


Figure 2.8 – *Distribution aléatoire de points à l’aide de la fonction ran2. Exemple pour 100, 1000, 10000 et 100000 tirages. La répartition des points est homogène à partir de 10000 tirages.*

#### 2.4.2 Calcul des trajectoires

Afin de déterminer la cellule d’impact d’une particule incidente, nous devons calculer sa trajectoire en fonction de ses conditions initiales et des contraintes extérieures qui lui sont imposées. Pourvu que la pression soit suffisamment basse, un neutre ne subit aucune contrainte, il se déplace en ligne droite depuis son injection dans le domaine de simulation jusqu’à la cellule de surface cible. Pour un ion, une contrainte extérieure conditionne sa trajectoire. Il s’agit d’un champ électrique perpendiculaire au substrat.

Ce dernier est induit par la différence de potentiel négative naturelle ou appliquée à la surface. De plus, lorsqu'on considère une accumulation de charges électriques sur la surface du masque, un autre champ électrique perpendiculaire à cette surface contribue également au calcul de la trajectoire.

Les particules incidentes sont suivies depuis leur position initiale (aléatoire) en haut du domaine de simulation (Fig. 2.9). Le déplacement de chaque particule indépendante se fait cellule par cellule. On définit alors un pas de temps  $du$  qui dépend de la taille de la cellule  $a$  et de la vitesse de la particule considérée  $v_p$  :  $du = a/v_p$ .

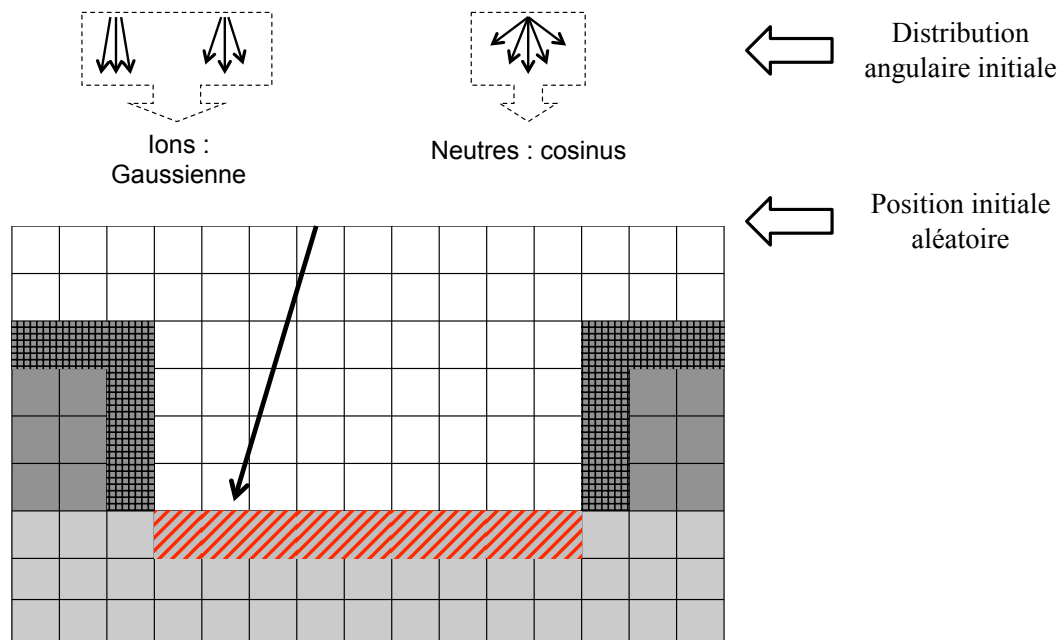


Figure 2.9 – Conditions initiales pour les particules. Elles partent du haut du domaine de simulation à une position horizontale choisie aléatoirement. L'angle initial est déterminé à partir des distributions angulaires : Gaussienne pour les ions (dont la largeur à mi-hauteur dépend de la pression), et en cosinus pour les neutres.

Comme la particule neutre suit une trajectoire rectiligne jusqu'au contact avec la surface, sa trajectoire ne dépend que de sa position initiale dans la grille  $r_{n0}$  et de son angle initial  $\theta_{n0}$  (choisi au hasard selon une distribution en cosinus) :

$$\vec{r}_n = v_{n0}(\theta_{n0})t + r_{n0} \quad (2.4)$$

L'ion est soumis au champ électrique  $\vec{E}_V$  perpendiculaire au substrat. Sa trajectoire est donnée par :

$$Q_i \vec{E}_V = m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} \Rightarrow \vec{r}_i = \frac{Q_i}{2m_i} \vec{E}_V t^2 + v_{i0}(\theta_{i0})t + r_{i0} \quad (2.5)$$

où  $Q_i$ ,  $m_i$ ,  $v_{i0}$ ,  $\theta_{i0}$ , et  $r_{i0}$  sont respectivement la charge, la masse, la vitesse initiale, l'angle d'incidence initial (choisi au hasard selon une distribution Gaussienne) et la position initiale de l'ion. Le champ électrique  $\vec{E}_V$  étant uniforme dans le profil, l'ion va suivre une trajectoire parabolique jusqu'à une éventuelle interaction avec la surface. S'il est réfléchi, l'orientation de sa vitesse change et si un autre champ électrique est présent (dû à une éventuelle accumulation de charges sur le masque), il est dévié.

Nous considérons des conditions aux limites périodiques, c'est-à-dire que si une particule sort du domaine de simulation, elle y est réinjectée. Par exemple, si un ion sort à droite du domaine ( $x > Na$ ), il est réinjecté à gauche ( $x = a$ ), avec le même angle d'incidence. Ainsi, aucune particule n'est perdue.

### 2.4.3 Réflexion des particules et interactions avec la surface : calcul de la normale

Comme nous l'avons vu, l'interaction entre les ions et la surface dépend de l'angle d'incidence. Dans le cas des incidences rasantes, il y a réflexion des particules. Ceci implique de calculer la pente locale de la surface afin de déterminer s'il y a réflexion ou pas. Pour la dépendance angulaire du rendement de gravure, il faut calculer l'angle entre l'ion incident et la normale. Pour cela, lorsqu'un ion arrive sur une cellule cible

(cellule dans l'état "interface plasma-matériau" ou "interface plasma-masque" que l'on nommera cellule de surface par la suite), nous examinons les cellules voisines. Toutes les cellules de surface incluses dans un rayon  $R = 10a$  autour de la cellule cible sont relevées et les coordonnées des centres de ces cellules sont stockées. Une régression linéaire de ces coordonnées nous donne la pente de la droite reliant au mieux ces points. Le choix de ce rayon ayant été fait après plusieurs simulations tests. La figure 2.10 illustre le calcul de la pente locale en fonction des cellules de surface voisines incluses dans un rayon  $R = 4a$ .

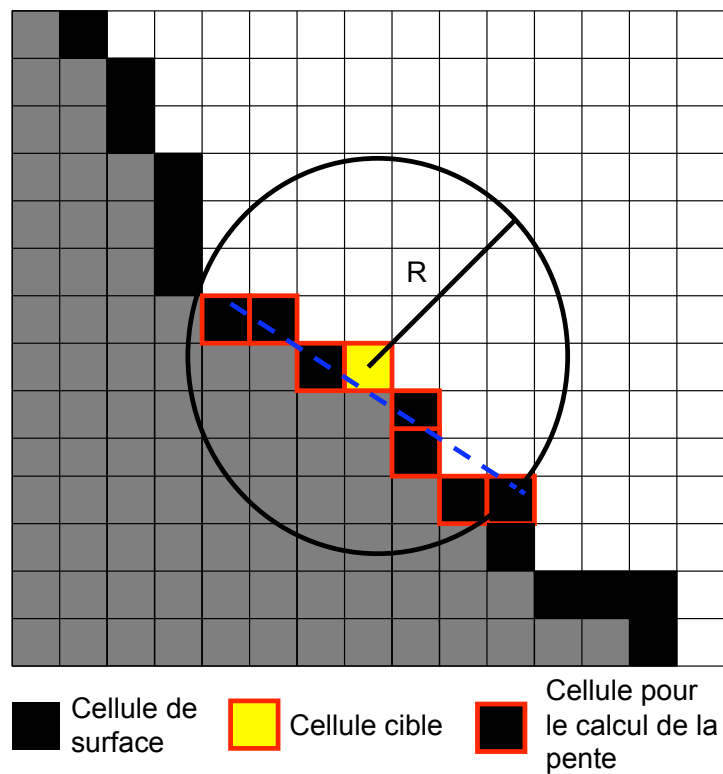


Figure 2.10 – Calcul de la pente à proximité de la cellule cible : les coordonnées des cellules de surface incluses dans un rayon  $R$  sont stockées, une régression linéaire nous donne la pente recherchée.

L'angle de sortie dépend de la pente locale et de l'angle d'incidence. De plus, la réflexion d'un ion sur la surface n'étant pas spéculaire (comme nous le verrons par la suite), il faut donc considérer un cône d'émission. On considère alors l'angle de sortie  $\theta_s \pm \Delta\theta_s$ , où

$\Delta\theta_s$  est une dispersion issue d'une distribution en cosinus centrée sur  $\theta_s$  (Fig. 2.11).

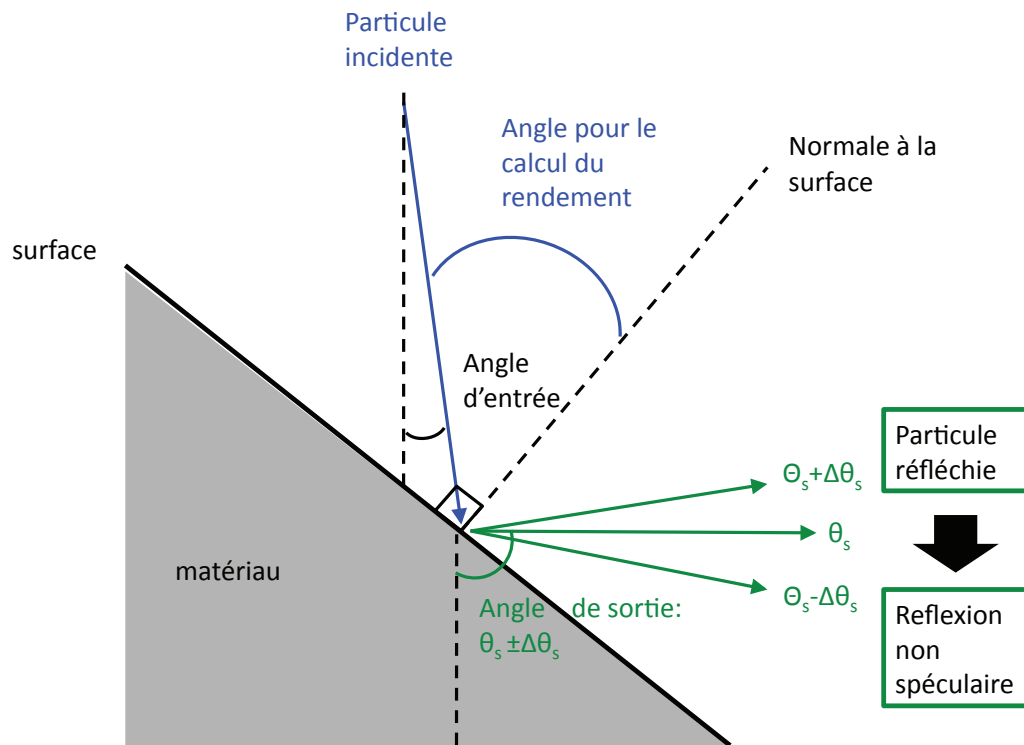


Figure 2.11 – Calcul de l'angle entre l'ion incident et la normale à la surface. L'angle après réflexion non spéculaire est compris dans un cône  $\theta_s \pm \Delta\theta_s$ .

## 2.5 Accumulation de charges

Les masques utilisés peuvent être de nature très différente, généralement un isolant comme du  $SiO_2$  ou les résines polymères (comme le HPR-504 ou le PMMA). Un polymère irradié par des ions positifs peut accumuler des charges sur sa surface de manière uniforme [43]. Cette accumulation de charges génère un champ électrique local perpendiculaire à la surface qui engendre une déflexion des trajectoires des ions incidents (Fig. 2.12).

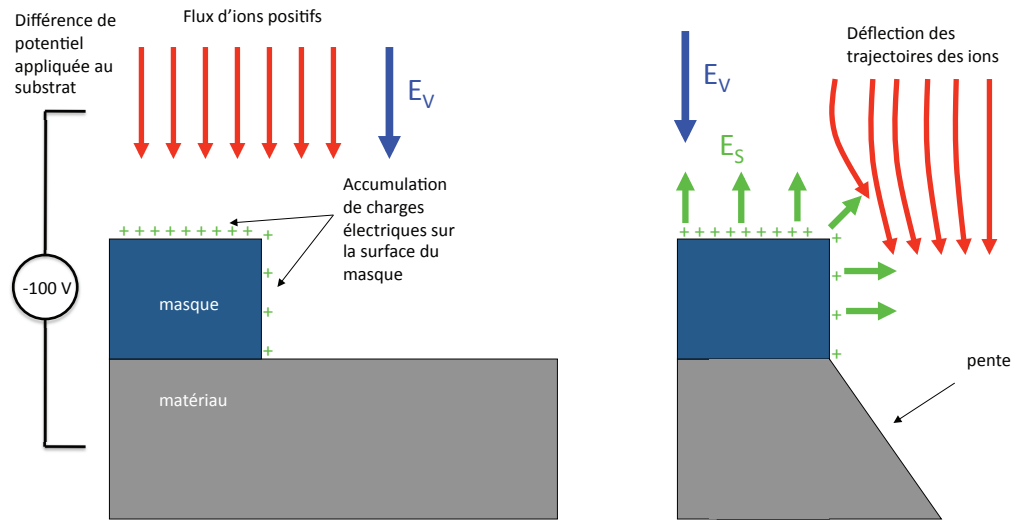


Figure 2.12 – Accumulation de charges électriques sur la surface du masque isolant. Le champ électrique induit  $\vec{E}_V$  perpendiculaire au substrat accélère les ions. Le champ  $\vec{E}_S$  perpendiculaire à la surface du masque modifie les trajectoires des ions.

L'équation du mouvement des ions est alors modifiée. Les ions subissent l'action du champ électrique  $\vec{E}_V$  induit par la différence de potentiel appliquée sur le substrat, et celle du champ électrique  $\vec{E}_S$  induit par les charges électriques présentes sur la surface. L'équation 2.5 devient :

$$\vec{r}_i = \frac{Q_i}{2m_i} \vec{E}_V t^2 + \frac{Q_i Q_S}{8\pi\epsilon m_i R^2} \vec{u}_R t^2 + \vec{v}_{i0}(\theta_{i0})t + \vec{r}_{i0} \quad (2.6)$$

où  $Q_S$  est la charge de la surface du masque,  $\epsilon$  la permittivité du plasma,  $R$  la distance entre l'ion et la cellule de surface du masque la plus proche. D'un point de vue algorithmique, à chaque étape d'avancement de l'ion, l'ensemble de la grille est examinée afin d'identifier la cellule de surface du masque la plus proche. Afin de simplifier les calculs et de manière à avoir une idée générale de l'effet de cette accumulation de charge, nous faisons le choix de calculer l'effet du champ électrique par rapport à la cellule de surface du masque la plus proche seulement.



## 2.6 Redépôt

Dans certaines conditions opératoires, notamment pour des pressions supérieures à quelques mTorr, un redépôt important de matière pulvérisée peut apparaître. Dans ce cas, un ion arrive sur une cellule cible et retire une certaine quantité d'atomes. Ceux-ci quittent la surface dans une direction définie par une distribution angulaire et peuvent intercepter la surface du masque, celle du matériau ou quitter le motif pour rejoindre le plasma. Si l'espèce pulvérisée revient sur le matériau, il y a redépôt en accord avec une probabilité de collage définie par l'utilisateur.

Lors de ce collage, le nombre d'atomes de la cellule cible est augmenté de la même valeur que le rendement de gravure "virtuel" et la cellule cible voit alors son contenu d'atomes augmenter. Cette augmentation est exactement égale au nombre d'atomes retirés de la cellule précédente. Si à l'issue de cet ajout, le nombre d'atomes de la cellule dépasse son nombre initial alors le voisinage est examiné et le surplus d'atomes est redistribué aux cellules adjacentes qui voient donc leur contenu augmenter. De plus, la cellule dans l'état "vide" la plus proche devient cellule de surface. La figure 2.13 illustre le changement d'état lors du redépôt. Ainsi, au fur et à mesure que les atomes pulvérisés s'accumulent, l'interface plasma-matériau évolue. Il y a donc une compétition entre gravure et redépôt.

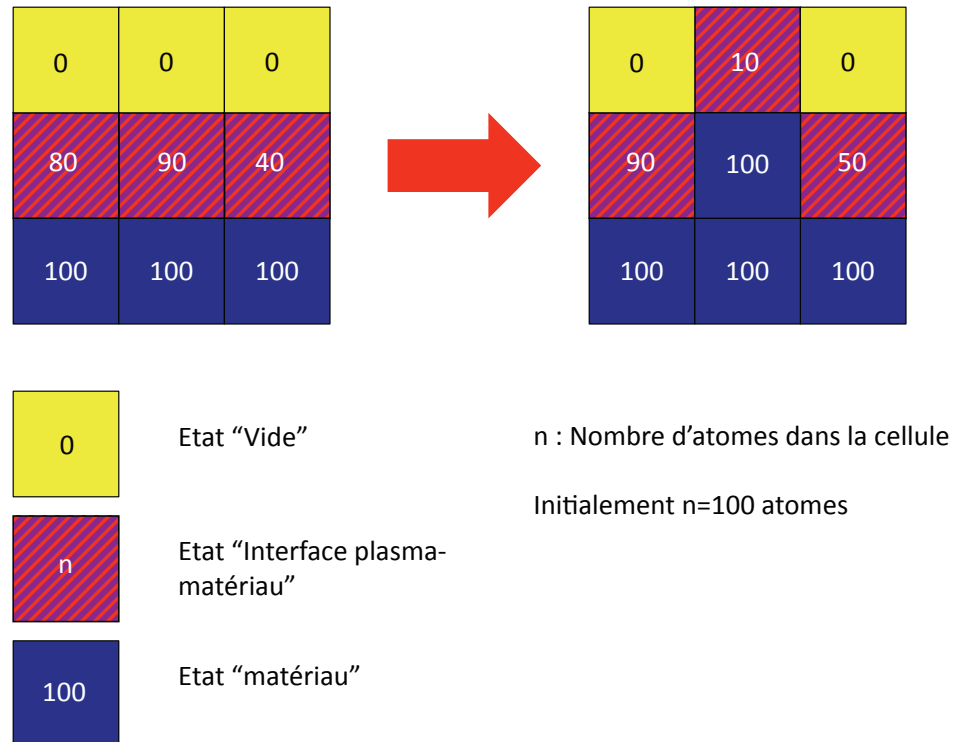


Figure 2.13 – Pour illustrer le redépôt : les cellules de surface contiennent ici 80, 90 et 40 atomes. La cellule du milieu reçoit 40 atomes, elle passe de 90 à 100 atomes. Elle change d'état et devient "matériau", les cellules voisines reçoivent équitablement le surplus d'atomes, ici plus 10 atomes chacune. La cellule dans l'état "vide" la plus proche reçoit 10 atomes et devient alors cellule de surface.

## 2.7 Conclusion

Ce chapitre constitue une synthèse de l'ensemble des techniques utilisées pour simuler la gravure de motifs dans un matériau. Dans un premier temps, nous avons présenté en détail comment est représentée l'évolution du profil simulé via le changement d'état des cellules. Dans un deuxième temps, le traitement des particules a été précisé, depuis le choix de ces dernières, jusqu'au calcul de leurs trajectoires et de leur interaction avec les cellules de surface. Enfin, nous avons montré les techniques numériques utilisées pour traiter la dépendance angulaire du rendement de gravure, ainsi que l'accumulation

de charges électriques sur le masque et le redépôt d'atomes pulvérisés.

L'ensemble de l'algorithme est schématisé sur la figure 2.14. Ce schéma est une représentation des divers modules associés à chaque mécanisme. Il représente la structure du simulateur, et la chronologie de l'algorithme, depuis l'injection des particules dans le domaine de simulation jusqu'à l'obtention d'une image du profil de gravure.

Le chapitre suivant illustre l'utilisation du simulateur dans des conditions précises, en vue de valider son bon fonctionnement et de mettre en avant les phénomènes qui apparaissent lors de la gravure de motifs dans un matériau.

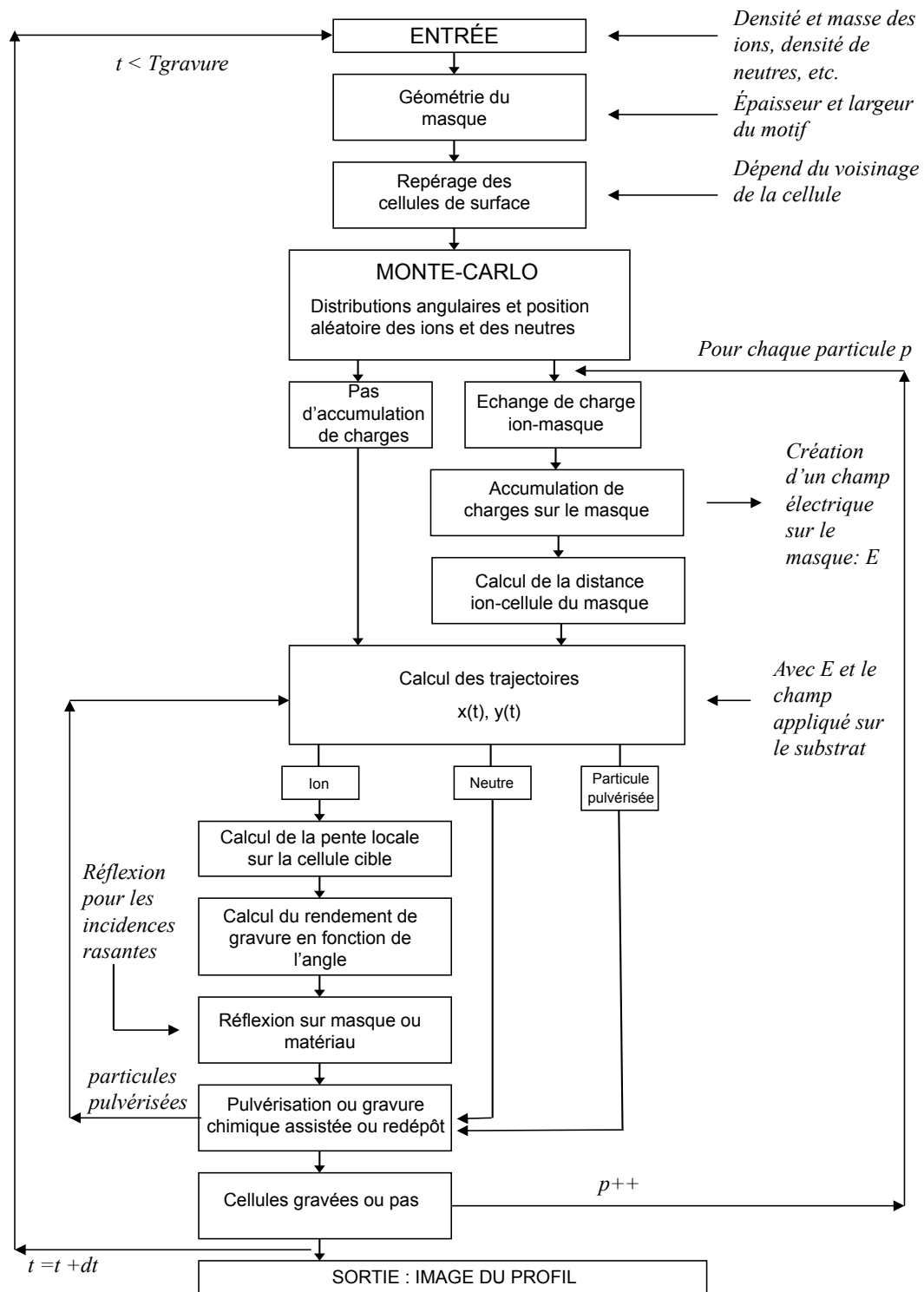


Figure 2.14 – Diagramme des diverses étapes de l'algorithme.

## CHAPITRE 3

### SIMULATION DES PROFILS DE GRAVURE : PULVÉRISATION ET GRAVURE CHIMIQUE ASSISTÉE PAR LES IONS

Nous présentons dans ce chapitre des résultats de simulation de profils de gravure dans divers matériaux et par divers plasmas. Le but est, ici, d'introduire les différents phénomènes qui entrent en jeu lors de la gravure, mais aussi de vérifier le bon comportement du simulateur en comparant les profils simulés aux profils expérimentaux, pour des conditions opératoires bien précises.

Nous nous intéressons plus particulièrement à la gravure du silicium. En effet, ce matériau est très largement utilisé en microélectronique depuis de nombreuses années. Il a donc fait l'objet d'études approfondies et la littérature est riche d'informations à son sujet. C'est de ce fait un très bon support pour investiguer l'ensemble des mécanismes fondamentaux qui entrent en jeu lors de la réalisation de dispositifs à l'échelle sous-micrométrique.

Dans un premier temps, nous considérons la gravure du silicium dans un plasma d'argon, puis, dans un deuxième temps, dans le chlore. Ces plasmas ont été aussi très largement étudiés, et leurs caractéristiques sont disponibles pour diverses configurations expérimentales. Ces études constituent ainsi une base de données abondante afin de tester notre simulateur dans des conditions précises.

Simuler l'évolution des profils de gravure exige d'avoir en notre possession des paramètres de base, notamment les caractéristiques fondamentales du plasma, comme la densité d'ions, la densité de neutres, la pression opératoire, l'énergie des ions, etc. Comme nous l'avons vu au premier chapitre, ces caractéristiques sont intrinsèquement liées à la

forme des profils de gravure. En effet, c'est la nature du gaz utilisé qui va définir le type de réaction qui aura lieu sur la surface. Par exemple, un plasma de chlore va réagir physiquement et chimiquement sur une surface de silicium, les ions  $Cl^+$  pulvérisent la surface et les neutres réactifs  $Cl$  réagissant chimiquement avec le  $Si$ . Cette dernière réaction est catalysée par le flux ionique incident. Un plasma d'argon va, quant à lui, fournir des ions  $Ar^+$  qui vont seulement pulvériser la surface. Comme nous allons le voir, la pression est un paramètre particulièrement déterminant. En effet, la pression est liée aux collisions entre les particules, et donc à l'angle d'impact des ions sur la surface. Pour une puissance injectée dans le plasma et une géométrie de réacteur données, elle définit le rapport des densités de neutres et d'ions, lequel a des conséquences directes sur la géométrie du profil.

L'étude de l'influence de ces caractéristiques sur la forme du profil de gravure nous permet de mettre en évidence les mécanismes qui entrent en jeu, mais surtout, les défauts qui peuvent apparaître à l'échelle micrométrique ou nanométrique. À cette fin, le chapitre est divisé en quatre parties.

Dans un premier temps, nous nous intéressons à la pulvérisation uniquement. Pour cela, nous traitons le cas de la gravure du silicium par un plasma d'argon. Nous montrons l'importance de la distribution angulaire des ions incidents sur la géométrie du profil. Nous détaillons le cas des ions à incidence rasante, et l'effet de la réflexion de ces derniers sur les parois, afin de mettre en évidence la formation de micro-tranchées à la base du profil. La sélectivité et la forme initiale du masque sont également évoquées. Nous verrons ainsi l'importance d'une microfabrication soignée à toutes les étapes.

Dans un deuxième temps, de manière à valider le bon fonctionnement du simulateur pour des matériaux de structure plus complexe, nous comparons le profil de gravure simulé dans du  $SrTiO_3$  avec un plasma d'argon à une image obtenue au microscope

électronique à balayage.

Dans un troisième temps, nous traitons de la gravure chimique assistée par les ions. Les profils simulés sont comparés à des profils issus de la littérature dans le cadre de la gravure du silicium par un plasma de chlore. Deux cas particuliers sont étudiés, pour deux pressions opératoires, à savoir 2 et 10 mTorr. La pression du plasma définit les densités d'ions et de neutres, et donc le rapport de flux de neutres sur ions. Nous montrons que les neutres, ajoutés aux ions, augmentent la gravure latérale. Nous mettons en évidence la gravure sous-masque et la formation de parois concaves lorsque le rapport de flux devient important.

Enfin, dans un quatrième temps, nous précisons les limites du simulateur en termes de dimensions des profils gravés.

Tout au long du chapitre, la dépendance angulaire du rendement de gravure sera évoquée pour expliquer la forme de certains profils de gravure. Mais son étude précise fait l'objet du dernier paragraphe (3.3.2) car les données relatives à cette dépendance, issues de la littérature, ne sont cohérentes que pour la gravure chimique assistée par les ions. Or, pour des raisons didactiques, ce type de gravure est étudié en fin de chapitre. Ainsi, nous verrons en dernier lieu, que la relation entre l'incidence des ions et le rendement de gravure est déterminante en ce qui concerne la géométrie du profil, notamment dans le cadre de la gravure du silicium et de l'oxyde de silicium par un plasma de chlore.

### **3.1 Pulvérisation du silicium dans l'argon**

Dans ce premier paragraphe, nous précisons les paramètres critiques et les mécanismes fondamentaux qui entrent en jeu lors de la gravure de profil dans le silicium par un plasma d'argon, ainsi que de leurs conséquences sur la forme finale du profil. Nous trai-

tons, dans l'ordre :

- ◇ La forme de la distribution angulaire des ions en fonction de la pression du plasma, à partir de données expérimentales issues de la littérature.
- ◇ La réflexion des ions sur les parois du masque et de la tranchée.
- ◇ Les défauts liés à cette réflexion, notamment le lien entre l'angle d'incidence des ions et la pression du plasma via la distribution angulaire des ions.
- ◇ La dispersion des ions réfléchis autour de la direction spéculaire.
- ◇ La sélectivité masque/matériau et l'influence de la forme initiale du masque.

Afin de limiter les mécanismes de gravure à la pulvérisation seulement, le gaz envisagé est l'argon. Aucun neutre réactif ( $Cl$  ou  $F$  par exemple) ne peut donc engendrer une gravure spontanée ou chimique assistée par les ions.

Notre objectif est ici de mettre en évidence le rôle de la seule pulvérisation sur la géométrie du profil. Cependant, il faut garder en tête que lors de la pulvérisation physique les mécanismes énoncés plus haut ont lieu simultanément de sorte que le profil final dépend de leur combinaison. De plus, nous faisons ici le choix de ne pas tenir compte du phénomène de redépôt des particules pulvérisées. Ceci est une approximation car, dans certaines conditions, le redépôt influence notablement la géométrie des profils. Cette hypothèse limite quelque peu les comparaisons entre les résultats du simulateur et les données de la littérature à ce stade. Nous revenons toutefois avec précision sur la question du redépôt dans le chapitre suivant.

### 3.1.1 Exemple d'évolution d'un profil de gravure

La figure 3.1 est un exemple d'évolution de profil de gravure tel que nous les présentons par la suite. Chaque image correspond à l'état du profil à différents instants successifs.



Dans cet exemple, le domaine de simulation contient  $200 \times 200$  cellules et la taille de chaque cellule est de  $0.01 \mu m$  ( $10 \text{ nm}$ ). Le domaine représente donc un carré de  $2 \mu m$  par  $2 \mu m$ . L'épaisseur du masque est de  $0.4 \mu m$ , la profondeur de la tranchée de  $0.75 \mu m$ , et sa largeur de  $0.5 \mu m$ . Les images de a) à e) schématisent donc l'évolution spatio-temporelle du profil. Dans tous les profils qui seront présentés au cours du chapitre, le masque est représenté en noir et le matériau en vert ou grisé.

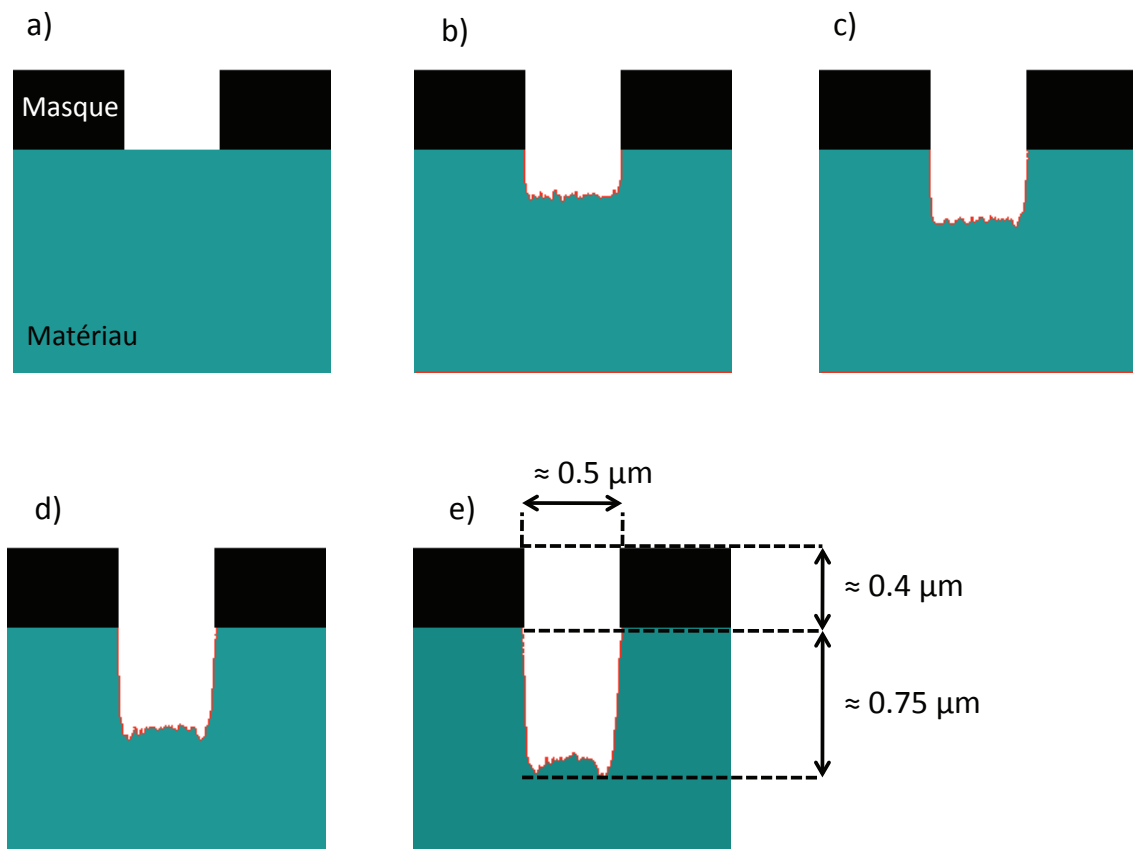


Figure 3.1 – Exemple de profil de gravure : chaque image représente le profil à des instants successifs de la gravure. Le domaine de simulation est de  $200 \times 200$  cellules de  $10 \text{ nm}$ . La tranchée a une largeur de  $0.5 \mu m$  et une profondeur de  $0.75 \mu m$  à la fin de la gravure. L'épaisseur du masque est de  $0.4 \mu m$ .

### 3.1.2 Distribution angulaire des ions incidents

#### 3.1.2.1 *Forme de la distribution angulaire des ions en fonction de la pression du plasma*

Afin de simuler un profil, le premier paramètre à prendre en considération est la distribution angulaire des ions. En effet, il s'agit du point de départ de nos simulations car il définit l'orientation initiale des particules (les ions dans ce cas). Ce paramètre est primordial pour simuler l'évolution du profil puisque la forme finale de celui-ci en dépend fortement.

Il faut noter que la pression du plasma est directement liée aux collisions des particules, le nombre de collisions augmentant avec la pression. De plus, la gaine est le lieu d'un champ électrique perpendiculaire au substrat, les ions étant alors soumis à son effet. Il faut également tenir compte du champ électrique accélérateur provenant de la tension généralement appliquée au substrat. Dans le cas idéal où les collisions seraient inexistantes, l'incidence des ions serait parfaitement normale au substrat. Cependant, même à basse pression, des collisions sont présentes dans la gaine, ce qui provoque une dispersion angulaire des ions de quelques degrés à quelques dizaines de degrés. Les données expérimentales donnent une forme quasi-Gaussienne pour la distribution angulaire des ions dont la largeur à mi-hauteur (LMH) dépend de la pression. Plusieurs études expérimentales nous donnent une information sur cette LMH en fonction de la pression. Dans nos simulations, nous utilisons donc une forme Gaussienne dont la LMH est adaptée à chaque cas traité à partir des données trouvées dans la littérature.

Woodworth *et al.* ont utilisé une décharge inductive d'argon afin de mesurer la distribution angulaire des ions. Les densités ioniques considérées sont comprises entre  $10^{11}$  et  $10^{12} \text{ cm}^{-3}$ . La distribution mesurée suit bien une loi Gaussienne dont la LMH varie de 10 à 18 degrés pour une pression comprise entre 2.5 et 18 mTorr [47]. Des mesures

faites dans un plasma de chlore montrent qu'elle varie de 12 à 15 degrés pour une pression comprise entre 20 et 50 mTorr [48]. Et enfin, dans un mélange chlore/argon, elle varie de 9 à 17 degrés entre 2.5 et 20 mTorr [49]. Aydil *et al.* [50] ont également mesuré la distribution angulaire pour un plasma d'argon dans un plasma haute-densité basse-pression (réacteur de type Hélicon). Les auteurs ont trouvé des LMH compris entre 5.5 et 13 degrés pour des pressions entre 0.5 et 4 mTorr. La figure 3.2 résume les différentes mesures expérimentales présentées ci-dessus.

On remarque, selon la figure 3.2, que la LMH augmente avec la pression, ce qui est conforme à nos attentes. L'influence de la nature du gaz est certainement présente, mais beaucoup moins évidente. Dans nos simulations, nous devons donc choisir la valeur correspondant aux conditions opératoires envisagées.

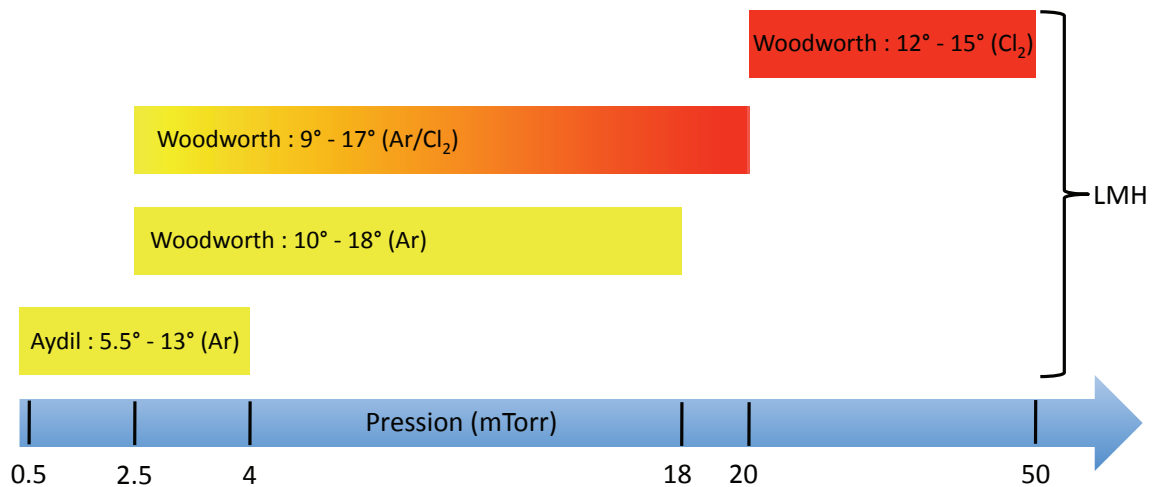


Figure 3.2 – Représentation schématique de la variation de la largeur à mi-hauteur de la distribution angulaire des ions incidents avec la pression selon les données expérimentales.

### 3.1.2.2 Effet de la distribution angulaire des ions sur le profil de gravure

Dans ce qui suit, nous simulons la gravure du silicium dans un plasma d'argon. Nous faisons l'approximation d'une sélectivité idéale, c'est-à-dire que le masque est considéré comme non gravé durant le processus. De plus, dans un plasma d'argon, il n'y a pas de neutre réactif, seul les ions assurant la pulvérisation du matériau. Nous choisissons une densité ionique de  $10^{11} \text{ cm}^{-3}$ , typique des plasmas à haute densité. L'énergie des ions est de 100 eV et la taille de la cellule de 10 nm. Le domaine de simulation est de  $200 \times 200$  cellules. La tranchée a une largeur de  $0.6 \mu\text{m}$  et une profondeur de  $0.75 \mu\text{m}$  à la fin de la gravure.

En se référant à la figure 3.2, nous avons simulé deux profils pour des LMH différentes, ce qui revient à considérer deux pressions opératoires distinctes. La figure 3.3a) correspond à un profil de gravure obtenu en considérant une distribution angulaire Gaussienne dont la LMH est de 5 degrés, ce qui équivaut à une pression inférieure à 0.5 mTorr. Pour la figure 3.3b), la LMH choisie est de 10 degrés, ce qui correspond à une pression de 2 mTorr.

Ces deux profils présentent un défaut communément observé en gravure par plasma, il s'agit du phénomène de micro-tranchées (*micro-trenching*) [54] [55]. Ces micro-tranchées sont dues à la réflexion des ions dont l'incidence est rasante par rapport aux parois verticales du masque et du matériau [33]. En effet, cette réflexion engendre une focalisation des ions près de la paroi à la base de la tranchée. Le nombre d'ions qui arrive sur la zone de focalisation étant plus important qu'au centre de la tranchée, la gravure y est aussi plus importante (Fig. 3.3-a<sup>1</sup>). La figure 3.3-b) présente des micro-tranchées de forme différente : elles sont plus larges, ce qui engendre la formation d'une "pointe" à la base

---

<sup>1</sup>On remarque un légère dissymétrie au niveau de la micro-tranchée sur ce profil. Cela est dû au fait que le code repose sur des concepts de tirage au hasard. Plus le nombre de tirages est important, plus le profil est symétrique.

de la tranchée. Cela est dû au fait que, lorsque que la pression augmente, les ions arrivent avec un angle plus grand par rapport à la surface de la paroi, ils sont donc réfléchis avec un angle plus élevé. Le point d'impact à la base de la tranchée aura lieu plus loin de la paroi verticale, c'est-à-dire vers le milieu de la base de la tranchée.

Dans la littérature, les études portant sur la forme des micro-tranchées ne concernent que la gravure chimique assistée par les ions. On ne peut donc pas comparer ici notre résultat de simulation avec l'expérience. Cependant, il est évident que la géométrie des micro-tranchées est liée à la pression.

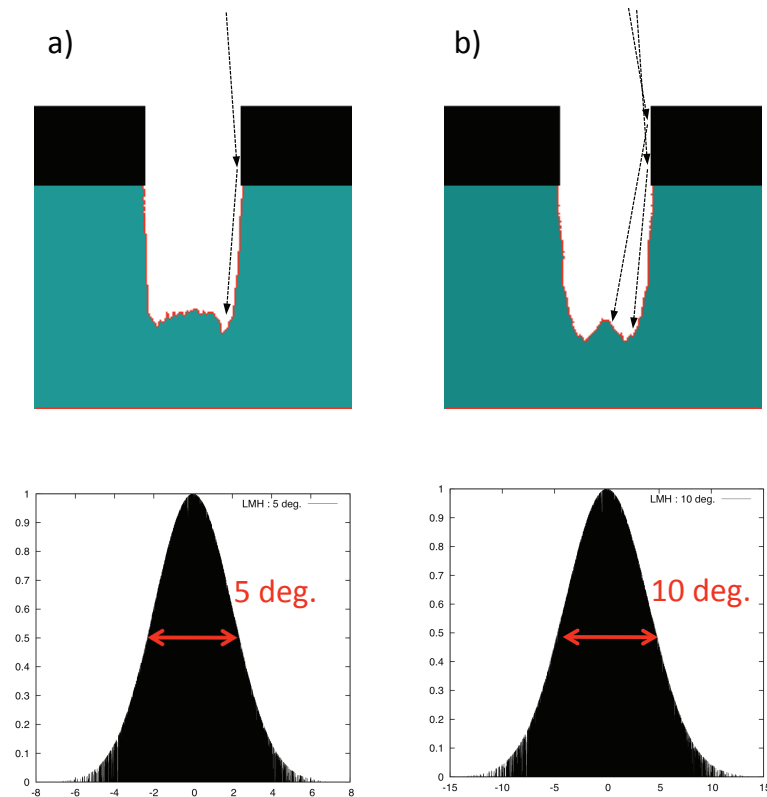


Figure 3.3 – *Forme des micro-tranchées en fonction de la distribution angulaire des ions incidents. Le motif a une largeur de  $0.6 \mu\text{m}$  et une profondeur de  $0.75 \mu\text{m}$ . Deux LMH pour la distribution angulaire des ions incidents sont utilisées : a) 5 degrés et b) 10 degrés, correspondant à des pressions de 0.5 et 2 mTorr. Dans les deux cas, les ions incidents sont réfléchis et des micro-tranchées se forment à la base des profils. La forme de ces micro-tranchées varie en fonction de la pression.*

### 3.1.3 Effet de la réflexion des ions sur les parois du motif

#### 3.1.3.1 *Micro-tranchées*

Nous venons de voir que la réflexion des ions sur les parois engendre des micro-tranchées aux pieds du profil. Nous revenons ici plus précisément sur ce phénomène qui est fondamental puisqu'il conditionne la géométrie globale du profil. La réflexion d'un ion dépend du type d'interaction de celui-ci avec la surface. On peut concevoir que l'interaction est différente selon que l'ion arrive perpendiculairement à la surface ou avec un angle rasant. Un ion arrivant perpendiculairement va déposer une énergie plus importante qu'à incidence rasante. Il va alors transférer sa quantité de mouvement aux atomes de surface qui vont être éjectés. Le fait de retirer des atomes de la surface va lui faire perdre la majeure partie de son énergie, de sorte qu'il n'intervient plus ensuite. Par contre, un ion arrivant avec une incidence rasante ne va déposer qu'une faible partie de son énergie. Cette faible interaction avec la surface va se traduire par deux phénomènes : d'une part, un retrait modéré (voire nul) d'atomes de surface et d'autre part, une réflexion de l'ion. Comme nous le verrons ultérieurement, ce comportement de l'ion vis-à-vis de la surface est directement lié à la dépendance angulaire du rendement de gravure. En effet, ce rendement diminue fortement lorsque l'angle d'incidence par rapport à la normale locale au matériau augmente. Les ions vont alors être réfléchis en conservant une grande partie de leur énergie. D'après Hoekstra *et al.* [33], plus de 90% des ions qui entrent en contact avec la surface à une incidence rasante sont réfléchis et conservent jusqu'à 99% de leur énergie.

Pour vérifier le lien entre réflexion et micro-tranchées, il suffit de simuler un profil en ne tenant pas compte des réflexions sur la surface. Si on se place dans les mêmes conditions que pour la figure 3.3a), mais sans prendre en compte la réflexion, on obtient le profil 3.4b). Effectivement, les micro-tranchées sont ici absentes, ce qui confirme que ces micro-tranchées sont effectivement dues à la réflexion des ions sur les parois du profil.

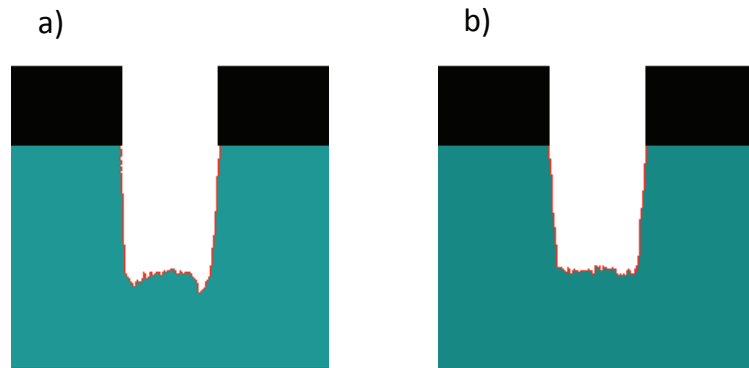


Figure 3.4 – *Réflexion des ions sur les parois. a) Profil de gravure avec réflexion des ions à incidence rasante sur les parois et micro-tranchées au pied du motif. b) Dans ce cas, on ne prend pas en compte la réflexion, les micro-tranchées sont absentes.*

### 3.1.3.2 *Dispersion angulaire des particules réfléchies*

Comme nous l'avons vu plus haut, l'impact des ions sur la surface du matériau donne lieu à deux types d'interactions. Soit il y a pulvérisation des atomes de surface et dans ce cas, l'ion perd toute son énergie. Soit l'ion dépose une petite quantité d'énergie sur la surface et subit une réflexion. Le type d'interaction dépend alors de l'angle d'incidence initial de l'ion, ce qui impose de connaître la forme de la distribution angulaire. De plus l'ion réfléchi va interagir ultérieurement avec le matériau de sorte qu'il est important de connaître avec précision la direction de l'ion après cette réflexion.

Deux types de réflexions sont envisagées. Par analogie avec l'optique, le premier type est une réflexion spéculaire, c'est-à-dire que l'angle après réflexion (angle de sortie) obéit aux lois de Snell-Descartes. La deuxième est une réflexion non spéculaire dite "diffuse", c'est-à-dire que l'angle de sortie est distribué autour de la direction spéculaire. Les observations expérimentales montrent que les surfaces gravées ne sont pas parfaitement lisses. On s'attend à ce que la rugosité de la surface engendre une réflexion diffuse [57]. Dans ce cas, l'angle de sortie peut s'écarter de quelques degrés par rapport à la direction obtenue en cas de réflexion spéculaire. Pour cela, nous modélisons l'angle de sortie selon

une distribution en  $\cos^n(\theta)$  autour de la direction spéculaire [23], la valeur de l'entier  $n$  étant ajustée conformément à la dispersion choisie. La déviation maximale, c'est-à-dire l'angle maximal par rapport à la direction spéculaire, est de l'ordre de quelques degrés, et est directement liée à la valeur de  $n$ .

Notre profil de référence est celui de la figure 3.3a) pour laquelle la réflexion est spéculaire. Les figures 3.5a)-c) représentent différents profils dans le cas de réflexions non spéculaires, pour différentes valeurs de  $n$ . La première observation est que si  $n$  augmente (c'est-à-dire que la distribution des ions réfléchis est plus étroite), la forme des micro-tranchées évolue.

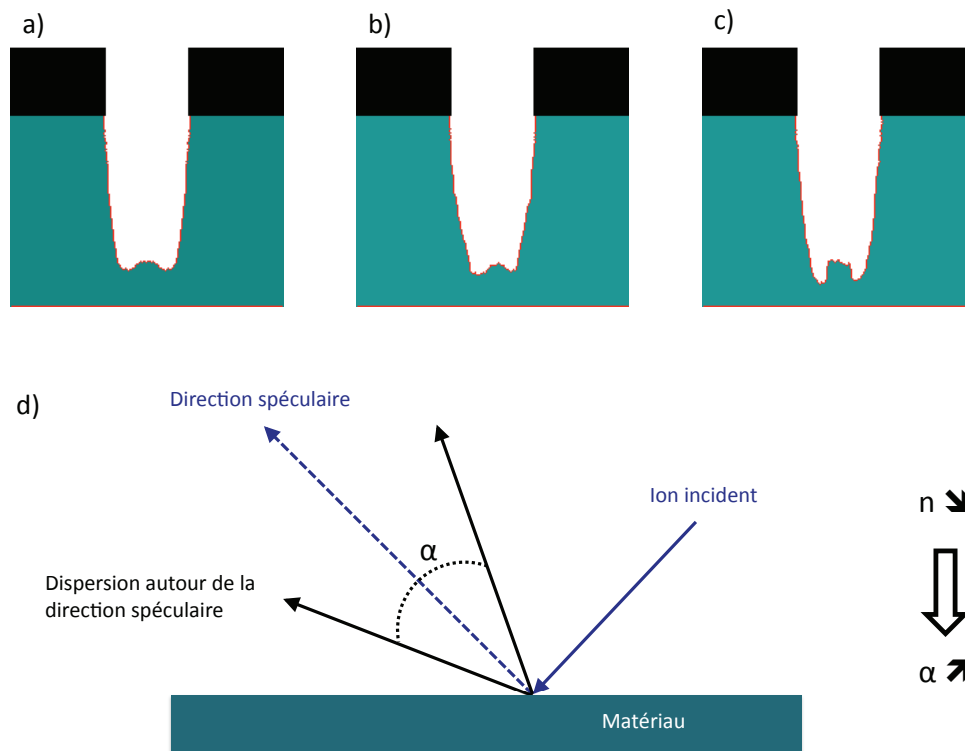


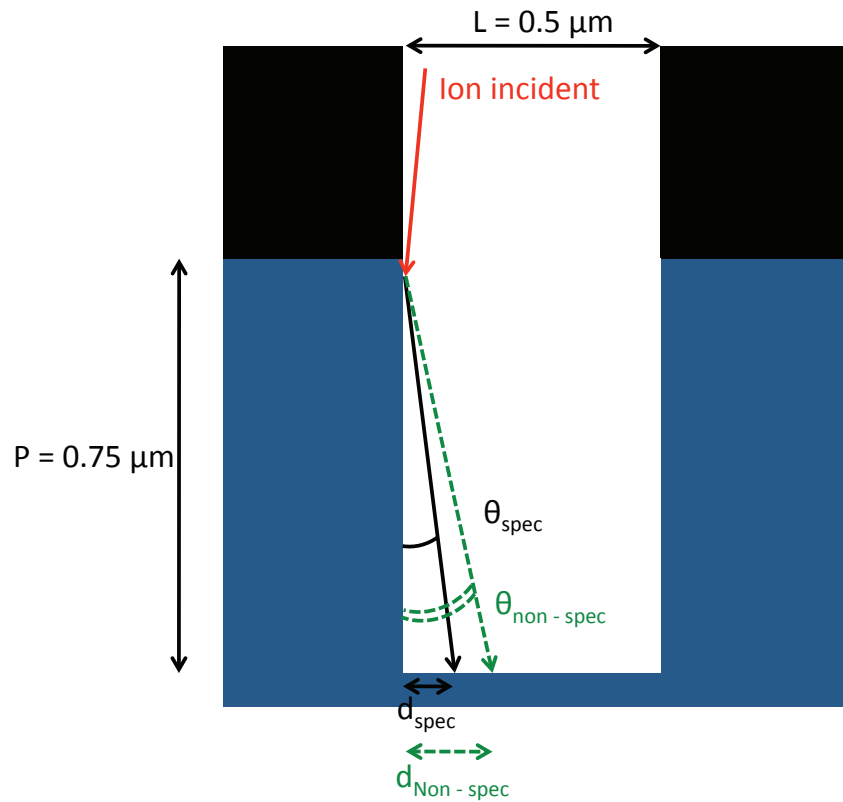
Figure 3.5 – Simulation de la réflexion non-spéculaire pour différentes valeurs de  $n$ . Pour la figure a),  $n = 50$ , pour b),  $n = 100$ , et pour c),  $n = 1000$ . La forme des micro-tranchées varie fortement avec  $n$ . La figure d) schématise la réflexion diffuse. La dispersion autour de la direction spéculaire augmente (i.e.  $\alpha$  augmente) si  $n$  diminue, et inversement.



Pour  $n = 200$ , la dispersion est d'environ 5 degrés autour de la direction spéculaire. Dans ce cas, les ions réfléchis sont focalisés sur une large zone à la base du motif et les micro-tranchées sont larges et peu profondes. En effet, étant donné que les dimensions des tranchées sont inférieures au micron, une déviation de quelques degrés correspond à un déplacement important dans la tranchée. Prenons l'exemple d'une tranchée de  $0.75 \mu m$  de profondeur et de  $0.5 \mu m$  de largeur ; considérons un ion incident qui heurte le haut de la tranchée avec un angle rasant de 2 degrés par rapport à la paroi verticale (88 degrés par rapport à la normale à la paroi). Si la réflexion est spéculaire, il va arriver à la base de la tranchée avec un déplacement horizontal de  $0.026 \mu m$  par rapport à la paroi. Mais si la réflexion est diffuse, et que sa déviation par rapport à la direction spéculaire est de 5 degrés, il va arriver à la base de la tranchée avec un déplacement horizontal de  $0.092 \mu m$ , ce qui représente un écart de  $0.07 \mu m$  par rapport au cas spéculaire, soit 14% de la largeur de la tranchée. La figure 3.6 résume cet exemple. Il est donc primordial de bien choisir la valeur de  $n$  afin d'obtenir un profil réaliste.

Pour  $n = 50$ , la dispersion est d'environ 10 degrés ; pour  $n = 100$ , elle est d'environ 7 degrés ; et pour  $n = 1000$ , elle est d'environ 2 degrés. Plus on se rapproche d'une réflexion spéculaire, plus les micro-tranchées sont fines et profondes. Notons que pour  $n = 1000$  la focalisation des ions se fait très près des parois, c'est le cas d'une réflexion quasi-spéculaire. À titre d'illustration, la figure 3.5d) schématise la dispersion angulaire autour de la direction spéculaire. Si  $n$  augmente, la dispersion diminue et si  $n$  diminue, la dispersion est plus importante.

En conclusion, le paramètre  $n$  joue un rôle important car il influe fortement sur la forme du profil. La seule manière de déterminer la valeur de  $n$  est de l'ajuster en comparant des profils simulés avec un profil expérimental. Comme nous le verrons plus loin, dans le cas de la gravure du  $SrTiO_3$  par un plasma d'argon, nous obtenons un très bon accord entre profil simulé et expérimental pour  $n = 200$ .



$$d_{\text{spec}} = P \tan \theta_{\text{spec}} = 0.026 \mu\text{m} (\theta_{\text{spec}} = 2^\circ)$$

$$\begin{aligned} d_{\text{non-spec}} &= P \tan (\theta_{\text{non-spec}}) = P \tan (\theta_{\text{spec}} + \Delta\theta) \\ &= 0.092 \mu\text{m} (\theta_{\text{spec}} = 2^\circ, \Delta\theta = 5^\circ) \end{aligned}$$

Figure 3.6 – Réflexion diffuse et zone d'impact de l'ion réfléchi. Dans le cas de la réflexion spéculaire, l'ion réfléchi arrive près de la paroi au fond de la tranchée ( $0.026 \mu\text{m}$ ). Pour une réflexion non spéculaire, avec une déviation de 5 degrés, l'ion arrive plus loin de la paroi ( $0.092 \mu\text{m}$ ). Le choix de la déviation maximale est donc déterminant pour évaluer la forme et la taille de la micro-tranchée.

### 3.1.4 Influence de la forme initiale du masque, sélectivité et formation de "facettes"

#### 3.1.4.1 Influence de la forme initiale du masque

La forme initiale du masque est un paramètre déterminant en ce qui concerne l'évolution du profil. En effet, c'est lui qui sert de guide aux ions incidents qui vont "éroder" le matériau. Nous avons évoqué dans le premier chapitre que l'étape de lithographie est déterminante dans la réalisation d'un profil de gravure. En effet, il s'agit de réaliser un masque présentant le moins de déformations géométriques possibles et ayant des parois les plus verticales possibles. Un masque présentant des parois inclinées est plus exposé au flux d'ions incidents, et sera donc plus sujet à de nombreuses réflexions entre les ions et sa surface, nous allons par ailleurs voir que cela engendre une déformation du profil de gravure.

Pour illustrer ce phénomène, nous avons repris la simulation précédente représentée sur la figure 3.3a), mais cette fois-ci en considérant un masque présentant des parois initialement inclinées à 70 degrés. Sur la figure 3.7b), les ions incidents rencontrent les parois inclinées du masque et sont réfléchis ; ils vont heurter la paroi opposée du matériau. Ces ions réfléchis vont entrer en contact avec le matériau selon un angle faible par rapport à la normale locale. Or, dans ce cas et comme nous le verrons plus loin, le rendement de gravure est important. Dans ces conditions, la vitesse de gravure horizontale (aussi appelée gravure latérale) va fortement augmenter. Le profil de gravure résultant va alors présenter des parois anormalement inclinées, ainsi qu'une gravure à la jonction entre le masque et le matériau. On parle alors de gravure sous-masque (*undercutting*) [58].

Ainsi, un masque présentant des parois non verticales engendre une perte évidente d'anisotropie. Ce résultat met en évidence l'importance de la géométrie initiale du masque, et donc d'une lithographie soignée.

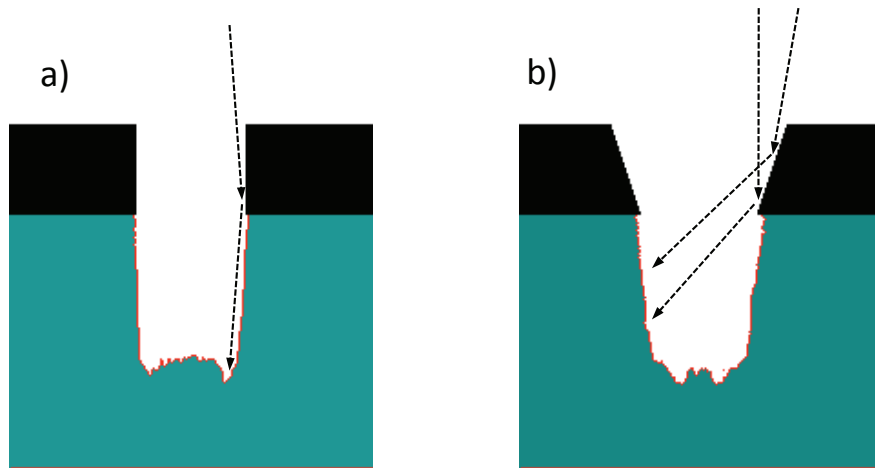


Figure 3.7 – *Effet de la pente du masque. Sur la figure b), le masque présente des parois inclinées à 70 degrés. Les ions incidents vont alors être réfléchis du masque vers la paroi opposée du matériau. Le profil va aussi présenter une gravure sous-masque et des parois anormalement gravées.*

#### 3.1.4.2 *Sélectivité matériau/masque et formation de "facettes" sur le masque*

Tout comme sa géométrie initiale, nous allons voir que la nature du masque est une caractéristique importante. Étant donné que le masque sert de "guide" aux ions et aux neutres, l'idéal est qu'il soit insensible à l'impact de ces particules, et que seul le matériau soit gravé, c'est-à-dire que l'on dispose d'une sélectivité optimale. D'un point de vue pratique, les masques utilisés sont généralement des isolants électriques, comme des polymères (HPR, PMMA). Occasionnellement, on fait aussi appel à des masques durs comme des métaux (*Cr*, *Ti*, etc.) ou des oxydes (*SiO<sub>2</sub>*) et des nitrures (*TiN*). Le choix se fait en minimisant le rapport entre les vitesses de gravure du masque et du matériau dans les conditions opératoires envisagées.

Pour mettre en évidence l'importance de la sélectivité, nous examinons la gravure par pulvérisation du silicium avec un masque de *SiO<sub>2</sub>* (Fig. 3.8). Pour ces deux matériaux, la vitesse de gravure est différente. Dans un plasma d'argon de haute-densité à pression suffisamment basse, le *SiO<sub>2</sub>* est gravé plus lentement que le *Si*. Par exemple, dans

les conditions opératoires de Salimian et Delfino, dans l'argon, la vitesse de gravure du  $SiO_2$  est de l'ordre de  $5nm/min$  [59]. D'autre part, dans des conditions similaires, Hu *et al.* ont mesuré une vitesse de gravure du  $Si$  supérieure à  $10nm/min$  [60]. À la vue de ces vitesses de gravure, la sélectivité du  $Si$  par rapport au  $SiO_2$  peut être alors supérieure à 2.

À titre d'illustration, nous avons simulé la gravure du  $Si$  masqué par du  $SiO_2$  en choisissant une sélectivité (arbitraire) de 5 (Fig. 3.8). À la fin du processus de gravure (Fig. 3.8d)), avec une telle sélectivité, l'épaisseur de masque gravée ( $SiO_2$ ) est d'environ  $0.2\mu m$ , et celle du  $Si$  est d'environ  $0.9\mu m$ . Le premier point à souligner est la forte gravure latérale du masque. En effet, initialement, celui-ci présente des parois bien verticales (Fig. 3.8a)), puis progressivement les coins du masque sont érodés (Fig. 3.8b)). Cette érosion s'accroît avec le temps pour conduire à des parois inclinées (Fig. 3.8c) et 3.8d)).

Cette érosion des coins du masque et la formation de parois inclinées sont dues à une vitesse de gravure horizontale importante pour le  $SiO_2$ . Ce phénomène est le résultat, comme nous le verrons en détail plus tard, de la dépendance angulaire du rendement de gravure. Le rendement de gravure du  $SiO_2$  dans l'argon est effectivement important pour les ions ayant une incidence située entre 40 et 70 degrés par rapport à la normale [16] (Fig. 1.6). Or, les ions considérés ici ont une incidence voisine de la verticale, avec un maximum de  $\pm 14$  degrés (Gaussienne avec une LMH de 10 degrés dans cette simulation). Le maximum de rendement est alors obtenu pour les ions heurtant les coins du masque. Ce phénomène est souvent observé et on parle alors de "facettes" (*faceting*) sur le masque [56].

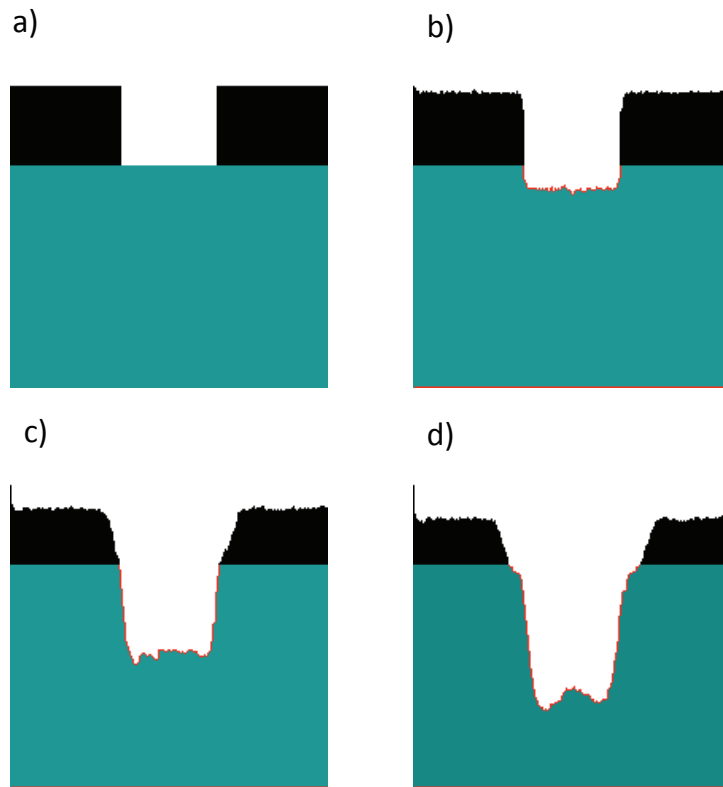


Figure 3.8 – De a) à d) : évolution du profil de gravure du Si masqué par du  $\text{SiO}_2$ . a) profil avant la gravure. b) des facettes se forment aux coins du masque sous l'impact des ions incidents. c) à d) les parois du masque s'inclinent. d) la forte gravure horizontale du masque "découvre" le matériau. Ainsi, la faible sélectivité engendre une perte de l'anisotropie de la gravure.

La figure 3.8 montre bien qu'une sélectivité de 5 engendre un profil inadéquat. Ainsi, les conséquences d'une sélectivité pas suffisamment élevée sont doubles :

- ◇ Les parois du masque peuvent s'incliner sous l'effet du flux d'ions, comme sur les figures 3.8b) et 3.8c) (la formation de "facettes" et l'accentuation de l'inclinaison des parois étant liées à la dépendance angulaire du rendement de gravure). De plus, comme nous l'avons vu dans le paragraphe 3.1.4.1, des ions peuvent être réfléchis sur ces parois inclinées et heurter le matériau sur la paroi opposée, ce qui favorise une gravure latérale du profil.

- ◇ Le masque étant fortement gravé latéralement, il va peu à peu "découvrir" le matériau (Fig. 3.8d)). Cette "récession latérale" du masque est source de profils présentant des parois très inclinées, non conformes à nos attentes.

### 3.2 Pulvérisation du $SrTiO_3$ (*STO*) dans l'argon

Les différentes approximations faites précédemment nous ont permis de mettre en évidence des mécanismes fondamentaux qui interviennent lors de la gravure du *Si*. Pour continuer de valider le simulateur, nous devons confronter celui-ci à d'autres types de matériaux. Depuis plusieurs années, notre groupe et ses collaborateurs ont un intérêt pour l'utilisation d'oxydes multicomposants dans le cadre d'applications à la fabrication de micro-dispositifs radiofréquences et photoniques. Dans ce cadre, divers matériaux ont été synthétisés sous forme de couches minces (*SBT*, *BST*, *STO*, *LaSrMnO<sub>3</sub>*, ...) et leur gravure par plasma a donné lieu à diverses publications. Ici, nous examinons le cas du *STO* dont la gravure a motivé des études approfondies. Nous avons donc simulé la pulvérisation de *STO* dans un plasma d'argon et comparé le profil à une image issue de l'expérience, obtenue au microscope électronique à balayage (MEB).

Le *STO* est un oxyde multicomposant qui a été étudié par Gaidi *et al.* dans le cadre d'applications photoniques [61]. L'étude de Gaidi *et al.* nous fournit une très belle image MEB d'un guide d'onde à moulure (*ridge waveguide*) qui sert de support pour notre comparaison (Fig. 3.9a) et 3.9b)).

Pour la simulation, nous utilisons toujours un domaine de  $200 \times 200$  cellules, de taille  $100 \text{ \AA}$ . Le flux d'ions positifs est  $J_i \approx 5.9 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$  [62]. La pression opératoire est de 0.5 mTorr, ce qui implique une LMH de 5 degrés pour la distribution angulaire Gaussienne des ions incidents (Fig. 3.2). La profondeur de gravure est de  $1 \mu\text{m}$ . La figure 3.9a) est l'image obtenue au MEB. Le profil présente une paroi verticale qui de-

vient légèrement bombée au bas. De plus, une large micro-tranchée de faible pente est également visible. Cette pente est cependant difficile à évaluer à cause de la perspective. La figure 3.9b) représente le résultat de notre simulation. Sur cette image, la paroi verticale et légèrement bombée est bien représentée, de même que la pente douce de la micro-tranchée. La profondeur simulée de la micro-tranchée est d'environ  $0.1 \mu\text{m}$ . Celle du profil expérimental est plus difficile à mesurer (encore une fois à cause de la perspective) mais est d'environ  $0.09 \mu\text{m}$ . Autrement dit, le profil simulé est en bon accord avec l'expérience. Il faut noter de plus que ce bon accord est obtenu en considérant  $n = 200$  pour la dispersion angulaire des ions réfléchis sur la paroi.

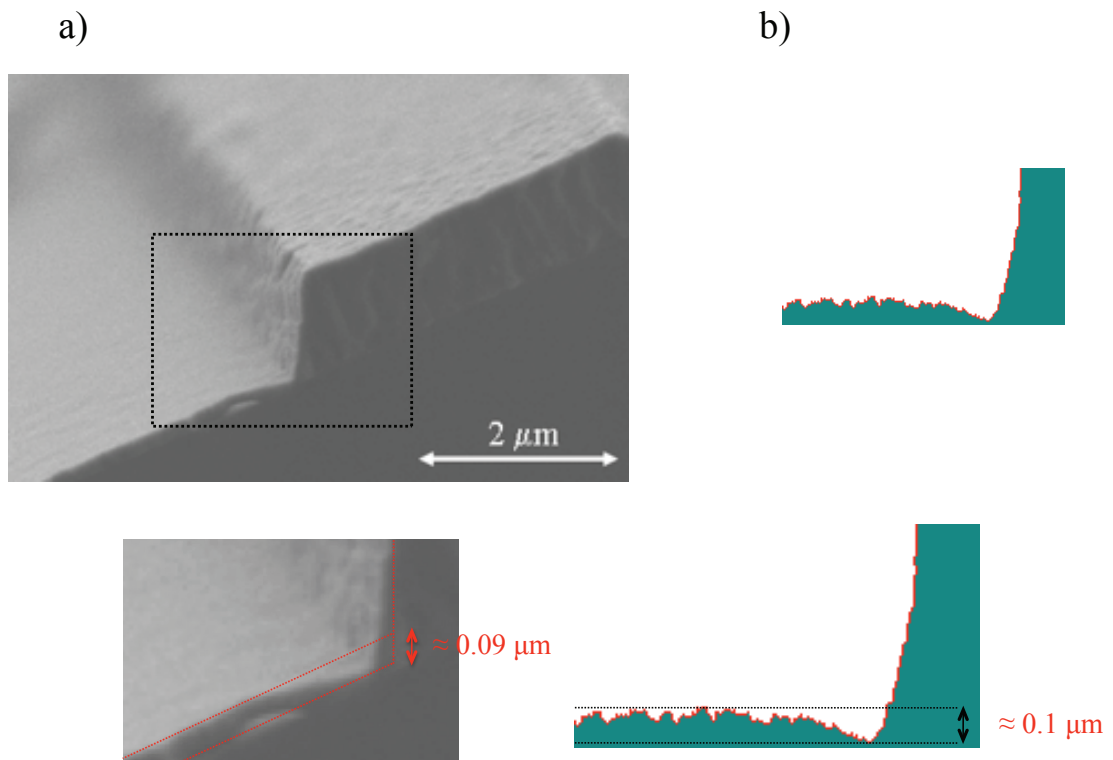


Figure 3.9 – Image MEB du STO gravé dans un plasma d'argon [61] (a) et profil simulé (b). La simulation représente correctement la légère courbure de la paroi. La micro-tranchée a également une forme similaire. La profondeur de la micro-tranchée simulée est la même que sur le profil expérimental, soit environ  $0.1 \mu\text{m}$ .



Dans cette section, nous avons évoqué différents mécanismes fondamentaux dont le rôle a été précisé. Aussi, les ions réfléchis à incidence rasante provoquent des micro-tranchées au pied des profils alors qu'un masque présentant des parois non verticales et une sélectivité insuffisante, engendrent une perte d'anisotropie et des défauts géométriques sur les profils gravés. Nous avons également montré le lien étroit entre la pression opératoire et l'angle d'incidence des ions, via la LMH de la distribution angulaire. Or, tous ces mécanismes entrent en jeu en même temps lors de la gravure. C'est pourquoi la comparaison entre des profils simulés et des profils expérimentaux est indispensable pour valider les hypothèses de calculs. Une telle comparaison nous a été utile pour valider le code du simulateur dans le cas simple de la pulvérisation, notamment dans le cas de matériaux multicomposants comme le *STO*. Le bon accord obtenu avec l'expérience nous permet de dire que les hypothèses faites sont correctes, et surtout que le simulateur se comporte bien, c'est-à-dire de manière réaliste. Nous pouvons considérer qu'une LMH de 5 degrés pour une pression de 0.5 mTorr, ainsi qu'une dispersion maximale de  $\pm 5$  degrés pour la réflexion des ions à incidence rasante, sont deux hypothèses valides, ce qui permet donc d'utiliser le code pour décrire des situations plus complexes. Dans le paragraphe suivant, nous introduisons des considérations chimiques en nous intéressant à la gravure du silicium et de l'oxyde de silicium dans un plasma de chlore.

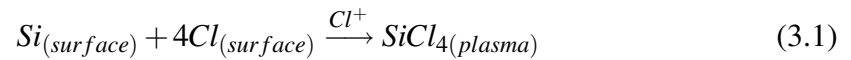
### **3.3 Gravure chimique assistée par les ions du silicium dans un plasma de chlore**

Dans cette section, nous appliquons le simulateur à l'étude de la gravure chimique assistée par les ions. Nous traitons le cas classique de la gravure du silicium (*Si*) dans un plasma de chlore, le masque utilisé étant de l'oxyde de silicium (*SiO<sub>2</sub>*). Dans ces conditions, les neutres réactifs (ici les atomes de chlore) interviennent lors du processus de gravure. Cependant, le *Si* et le *SiO<sub>2</sub>* ne sont que très peu gravés spontanément par les atomes de *Cl* à température ambiante. En effet, le rendement de gravure chimique spontanée du silicium par le chlore est très faible. Humbird et Graves rapportent un ren-

dement de 0.005 atome de  $Si$  par  $Cl$  incident [63]. L'apport des ions du plasma permet d'aider les produits de réactions à désorber de la surface [64].

Aux basses pressions considérées (0.1 à 10 mTorr), les atomes de  $Cl$  subissent peu de collisions dans la gaine. Cependant, contrairement aux ions, ils sont insensibles au champ électrique appliqué sur le substrat : ils ne sont ni guidés, ni accélérés par ce dernier. Afin de traduire cette absence de directionnalité privilégiée des neutres, nous faisons le choix d'une distribution angulaire isotrope suivant une loi en cosinus. Ils arrivent alors sur la surface avec une large dispersion angulaire.

Malgré la forte densité des ions, le flux de neutres est suffisamment important pour faire l'hypothèse que la surface du matériau à graver est saturée d'atomes de chlore. Dans ce cas, la réaction sur la surface de  $Si$  sous le flux de  $Cl^+$  est :



et les produits de désorption sont  $SiCl_4$ . Ces produits quittent la surface soit pour rejoindre le plasma, soit pour coller (redépôt) sur le matériau et le masque. Soulignons que le redépôt de matière pulvérisée n'est pas traité dans ce chapitre mais le sera au chapitre suivant. Cependant, ignorer le redépôt dans le cas présent est plutôt valable puisque le coefficient de collage des espèces désorbées est très faible [65].

### 3.3.1 Simulation des profils à basse et haute pression

#### 3.3.1.1 Rapport de flux neutres/ions et sélectivité

Dans un plasma, les densités d'ions et de neutres varient avec la puissance apportée au plasma et avec la pression opératoire. La géométrie d'un profil de gravure dépend directement de ces densités et plus particulièrement du rapport de flux de neutres sur

ions. En effet, on s'attend à ce qu'un faible rapport de flux favorise des profils anisotropes, car dans ce cas, la gravure par les ions directionnels est prédominante. Dans le cas d'un rapport plus important, les neutres vont non seulement contribuer à la gravure chimique assistée par les ions, mais aussi engendrer une gravure spontanée. Puisque que la distribution des neutres est isotrope, un rapport de flux important implique une gravure également isotrope, notamment latérale, ce qui conduit à une perte d'anisotropie.

Vyvoda *et al.* ont étudié les effets de la pression du plasma sur l'évolution des profils de gravure dans *Si*, masqué par du *SiO<sub>2</sub>*, dans un plasma de chlore à basse pression [66]. Les profils expérimentaux qu'ils ont obtenus peuvent être comparés à nos profils simulés. Pour cette étude, nous nous plaçons à deux pressions, à savoir de 2 et 10 mTorr. Malyshv et Donnelly ont déterminé les caractéristiques du plasma utilisé par Vyvoda *et al.*. Leur étude nous fournit les éléments clés pour notre simulateur, c'est-à-dire les densités de neutres et d'ions en fonction de la pression du gaz. Ces densités nous permettent de calculer les rapports de flux. Dans les deux cas qui nous intéressent, les densités ioniques ( $n_i = n_{Cl_+} + n_{Cl_2+}$ ) [67] et de neutres réactifs ( $n_{Cl}$ ) [68] mesurées sont  $n_i = 7 \cdot 10^{10} \text{cm}^{-3}$  et  $n_{Cl} = 4 \cdot 10^{13} \text{cm}^{-3}$  à 2 mTorr, et  $n_i = 7 \cdot 10^{10} \text{cm}^{-3}$  et  $n_{Cl} = 1.2 \cdot 10^{14} \text{cm}^{-3}$  à 10 mTorr. Dans ces conditions, les rapports de flux calculés (*cf* paragraphe 2.4.1) sont :  $J_n/J_i = 22$  à 2 mTorr, et  $J_n/J_i = 66$  à 10 mTorr.

La sélectivité de gravure *Si* : *SiO<sub>2</sub>* est déterminée à partir du modèle analytique présenté dans le chapitre 2. Pour *Si*, le rendement de pulvérisation calculé est d'environ 0.21 et pour le *SiO<sub>2</sub>*, il est d'environ 0.024, ce qui nous donne une sélectivité *Si* : *SiO<sub>2</sub>* d'environ 9 :1. D'un point de vue expérimental, Vyvoda *et al.* n'ont pas mesuré indépendamment les vitesses de gravure du masque et du matériau pour déterminer la sélectivité. Ils l'ont estimée en comparant les profils avant et après la gravure, plus exactement, à partir des épaisseurs initiale et finale du masque, de la profondeur gravée et du temps de gravure du matériau. Selon les auteurs, à 2 mTorr, la sélectivité du *Si* : *SiO<sub>2</sub>* est 10 :1, ce qui est

tout à fait comparable à notre situation.

Pour les simulations envisagées, le domaine contient  $200 \times 200$  cellules et la taille d'une cellule est de  $65 \text{ \AA}$ . Le domaine de simulation mesure donc  $1.3 \mu\text{m}$  de côté. Le masque de  $\text{SiO}_2$  a une épaisseur initiale de  $0.35 \mu\text{m}$  et la largeur du motif est de  $0.4 \mu\text{m}$ . Initialement, le masque a des parois légèrement inclinées de  $82$  degrés par rapport à l'horizontale [54]. À la fin de la gravure, la profondeur de la tranchée est de  $0.86 \mu\text{m}$ .

### 3.3.1.2 Cas à basse pression (2 mTorr)

Nous traitons ici le cas à 2 mTorr, c'est-à-dire pour un rapport de flux de neutres sur ions  $J_n/J_i = 22$ . Comme la LMH de la distribution angulaire des ions dans le chlore n'est connue que pour une pression supérieure à 20 mTorr (*cf* paragraphe 3.1.2.1), nous avons dû tester plusieurs valeurs. Cependant, d'après les LMH données pour un plasma d'argon et pour un mélange chlore/argon à basse pression, on s'attend à une LMH inférieure à 10 degrés. Le meilleur accord entre profil simulé et expérimental est obtenu avec une LMH de 5 degrés. Le profil simulé est représenté sur la figure 3.10a) et le profil expérimental [66], sur la figure 3.10b).

Globalement, le profil simulé présente un très bon accord avec l'expérimental. En effet, les parois sont légèrement inclinées (environ  $85$  degrés par rapport à l'horizontale) mais linéaire. En outre, la forme des micro-tranchées est arrondie et les proportions du profil sont les mêmes. Plus précisément, les figures 3.10c) et 3.10d) sont un agrandissement des microtranchées. Sur ces images, on voit que les micro-tranchées sont de la même forme et de dimensions quasi-identiques. La simulation donne une profondeur de chaque micro-tranchée de  $0.10 \mu\text{m}$  et une largeur de  $0.18 \mu\text{m}$ , alors que sur le profil expérimental, la profondeur est de  $0.11 \mu\text{m}$ , et la profondeur de  $0.2 \mu\text{m}$ . Nous considérons donc que le simulateur prédit des profils tout à fait conformes à l'expérience.

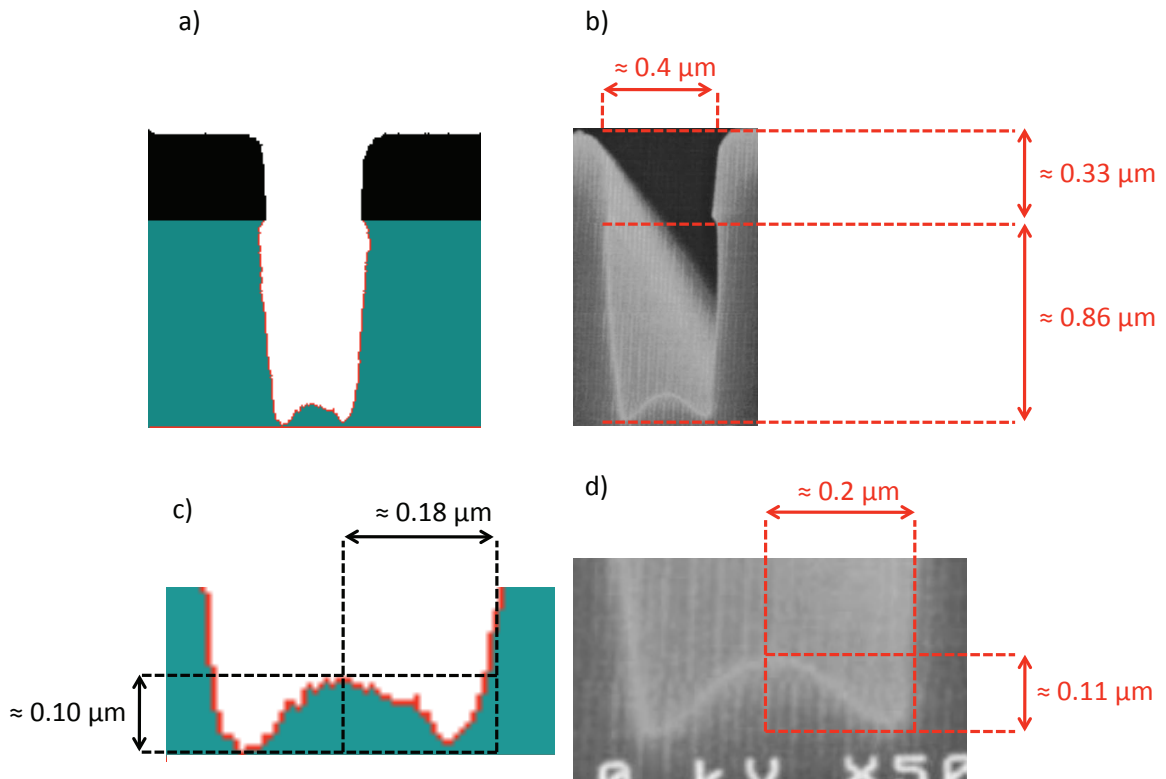


Figure 3.10 – Comparaison entre le profil simulé et expérimental d'une tranchée dans du Si, masqué par du SiO<sub>2</sub>, dans un plasma de chlore à 2 mTorr. La figure a) représente le profil simulé et b) le profil expérimental, d'après [66]. Globalement, les proportions sont semblables et l'accord est bon. Les figures c) et d) sont des agrandissements des micro-tranchées. La forme et les dimensions simulées sont quasi-identiques à celles de l'expérience.

La figure 3.11 a) représente le domaine de simulation avant la gravure, les coins supérieurs du masque présentant initialement un changement de pente abrupt. Sur la figure 3.11 b), le masque apparaît légèrement gravé, la sélectivité relevée par Vyvoda *et al.* étant de l'ordre de 10 :1. Par contre, les coins supérieurs présentent une inclinaison beaucoup plus importante à la fin de la gravure qu'initialement puisqu'ils se sont arrondis sous l'effet du flux de particules incidentes. C'est le phénomène de "facettes", déjà évoqué dans le paragraphe 3.1.4.2. Les figures 3.11 c)-e) sont des agrandissements des coins du masque. Comme on peut le voir sur les figures 3.11 d) et 3.11 e), le simulateur représente

bien les facettes observées expérimentalement.

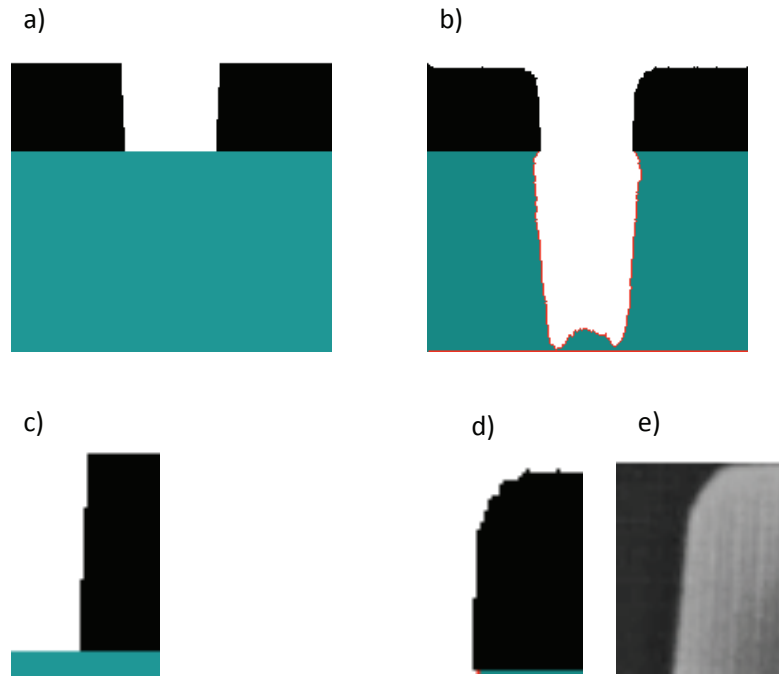


Figure 3.11 – *Formation de facettes aux coins supérieurs du masque. Initialement, le masque présente des coins à angle droit (a et c), à la fin de la gravure les coins sont arrondis (b et d). Les facettes du profil expérimental [66] (e) sont correctement simulées sur (d).*

Enfin, la figure 3.12a) présente un agrandissement de la paroi au niveau de l'interface masque-matériau. On remarque une gravure, à la jonction entre le  $SiO_2$  et le  $Si$ . C'est la gravure sous-masque que nous avons décrite précédemment dans le paragraphe 3.1.4.1. Elle est due à la réflexion des ions sur les parois non verticales du masque [58].

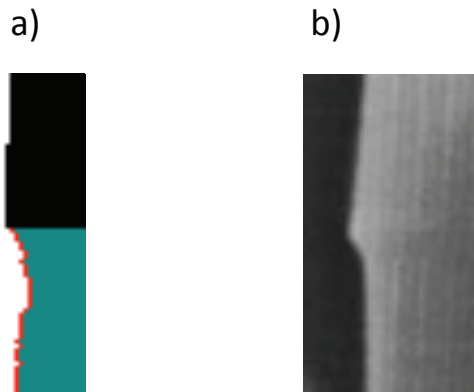


Figure 3.12 – *Agrandissement de la jonction entre le masque ( $SiO_2$ ) et le matériau ( $Si$ ). La gravure sous-masque observée (b) est bien simulée [66] (a).*

### 3.3.1.3 Cas à haute pression (10 mTorr)

À 10 mTorr, la densité ionique est la même qu'à 2 mTorr, mais la densité de neutres est plus élevée, soit  $n_{Cl} = 1.2 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , ce qui donne un rapport de flux  $J_n/J_i = 66$ . Selon les mesures expérimentales présentées au paragraphe 3.1.2.1, la LMH de la distribution angulaire est de 12 degrés pour une pression de 20 mTorr dans le chlore. On s'attend à ce qu'à 10 mTorr, la LMH soit inférieure à 12 degrés. Après plusieurs tests, le meilleur accord entre profils expérimental et simulé est obtenu avec une LMH de 7 degrés. La figure 3.13a) représente le profil simulé, et la figure 3.13b), le profil expérimental [66].

Globalement, la forme du profil simulé est en accord avec l'expérience. Encore une fois, les micro-tranchées sont présentes au pied du motif. Toutefois, le point important à souligner est la concavité des parois. En effet, comme la distribution des neutres est isotrope,

ils vont uniformément recouvrir toute la surface du motif, notamment les parois verticales. Les neutres ont un rendement de gravure 100 fois plus faible que les ions, mais, à 10 mTorr, leur flux étant 66 fois plus important que celui des ions, leur participation à la gravure est importante. Ce sont les neutres, aidés par les ions, qui sont responsables de la gravure latérale des parois, et donc de leur forme concave (*bowing*). La concavité est en effet accentuée par l'impact des ions à incidence rasante. Ceux-ci rencontrent une paroi moins verticale que dans le cas de la pulvérisation simple et vont donc déposer une quantité d'énergie plus importante et, par conséquent, accentuer la gravure latérale.

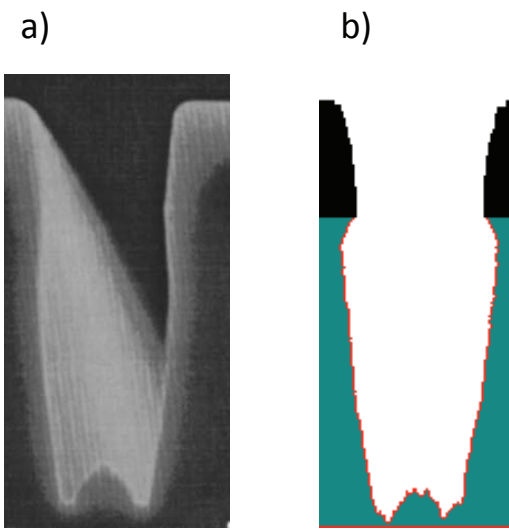


Figure 3.13 – Profil de gravure du Si dans le chlore pour une pression de 10 mTorr. a) Profil expérimental, d'après [66]. b) Profil simulé. Les parois sont concaves en haut du profil à cause de l'action combinée des neutres et des ions.



La figure 3.14 montre l'évolution temporelle du profil de gravure. Sur la figure 3.14b-1), l'inclinaison initiale du masque engendre la formation de micro-tranchées larges et arrondies. Leur forme évolue pendant le processus de gravure. Sur la figure 3.14b-2), on voit que la gravure sous-masque commence à apparaître ainsi que la formation des parois concaves. Les figures 3.14b-2) et 3.14b-3) montrent une concavité de plus en plus importante. Sur la dernière figure (Fig. 3.14b-4), le haut de la tranchée présente des parois plus concaves que le bas. Ceci est dû au fait que peu de neutres ont une incidence proche de la verticale, de sorte que peu d'entre eux arrivent au fond de la tranchée, étant stoppés par les parois à l'entrée de la tranchée. Ainsi, la participation des neutres à la gravure sera plus importante en haut qu'à la base de la tranchée. C'est pourquoi les parois au bas de la tranchée sont moins inclinées qu'en haut.

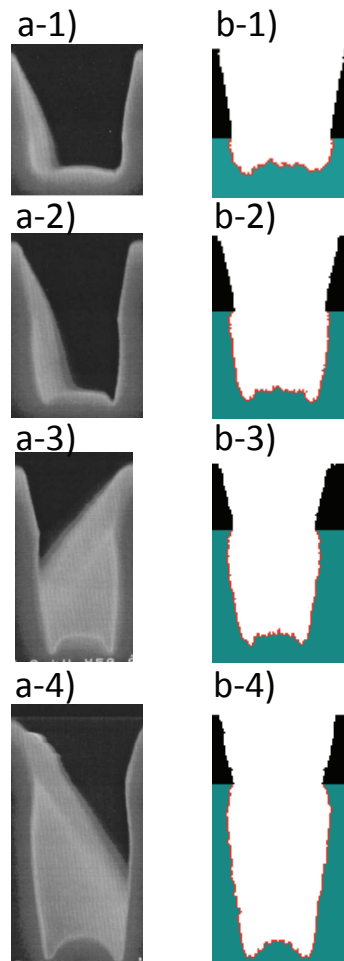


Figure 3.14 – Évolution temporelle de la gravure du Si dans le chlore pour une pression de 10 mTorr. Des micro-tranchées apparaissent dès le début du processus à cause de la légère pente initiale du masque (b-1). Des parois concaves se forment progressivement (b-2) à b-4)) sous l'action combinée des ions et des neutres. Notons que le halo apparent sur les images MEB est dû à un effet d'optique.

La comparaison avec les profils expérimentaux obtenus à des instants successifs montre un bon accord avec les profils simulés. Cependant, on peut remarquer que la gravure sous-masque simulée est plus importante que sur le profil expérimental. Comme nous le verrons dans le chapitre 4, ceci est dû au phénomène de redépôt qui prend de l'importance à 10 mTorr. Même si dans le cas du  $SiCl_4$  formé par interaction du  $Cl$  avec le  $Si$ , le coefficient de collage est faible, une faible quantité de matière se redépote sur les parois,

notamment en haut de la tranchée. Le fait de ne pas prendre en compte ce mécanisme explique donc bien l'excès de gravure sous-masque obtenu par calcul.

#### 3.3.1.4 Effet du rapport de flux

Nous avons vu que le rapport de flux de neutres sur ions conditionne la forme finale du profil de gravure. Dans le cas de la pulvérisation simple, c'est-à-dire sans neutres réactifs, les parois des profils sont verticales. Avec un plasma de chlore, nous avons observé que les neutres engendrent une gravure latérale des parois. Pour un faible rapport de flux ( $J_n/J_i = 22$  à 2 mTorr), les parois restent presque verticales (environ 85 degrés par rapport à l'horizontale), mais pour un rapport plus important ( $J_n/J_i = 66$  à 10 mTorr), les parois deviennent concaves. Ainsi, le gain en terme de vitesse de gravure obtenu grâce aux neutres réactifs doit être relativisé car la perte d'anisotropie est significative. La figure 3.15-a) représente le profil calculé à 2 mTorr ( $J_n/J_i = 66$ ) et la figure 3.15-b) représente le cas d'un rapport de flux  $J_n/J_i = 280$ . Avec un tel rapport de flux, les neutres dominent la gravure. Ils sont directement responsables de la forte gravure latérale à l'origine de la concavité excessive des parois.

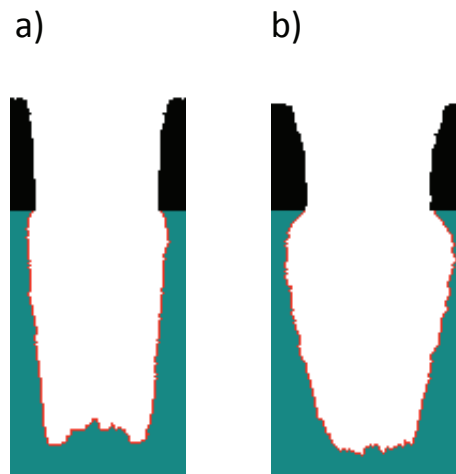


Figure 3.15 – Effet du rapport de flux. La figure a) est le cas précédemment étudié avec  $J_n/J_i = 66$ . La figure b) représente le cas d'un fort rapport de flux ( $J_n/J_i = 280$ ), le profil présente une forte gravure sous-masque ainsi que des parois beaucoup plus concaves.

### 3.3.2 Dépendance angulaire du rendement de gravure

Jusqu'ici, nous avons souvent évoqué la dépendance angulaire du rendement de gravure. Nous avons introduit ce concept dans le paragraphe 1.3.3 et montré comment nous l'intégrons au simulateur (*cf* paragraphe 3.3.2). Nous y avons fait appel pour justifier certains aspects géométriques qui peuvent être accentués par cette dépendance, comme les micro-tranchées (*cf* section 3.1.3.1). Dans la section 3.1.4.2, nous avons évoqué qu'elle est responsable de la formation de "facettes" sur le masque.

Pour mettre en évidence l'importance de la dépendance angulaire du rendement de gravure, nous devons répondre à deux exigences. La première est de connaître sa forme analytique ; or celle-ci dépend fortement des conditions opératoires (type de gaz utilisé, matériau gravé). La deuxième est de pouvoir comparer les profils simulés à l'expérience. Pour le premier point, la forme analytique est déterminée à partir de l'ajustement (*fitting*) des données expérimentales, celles-ci étant nombreuses dans la littérature. Pour le deuxième point, il faut avoir des profils expérimentaux dans les mêmes conditions opératoires qui ont permis d'évaluer la dépendance angulaire du rendement. Ainsi, ces deux contraintes limitent nos investigations.

Les données, issues de la littérature, qui nous permettent, à la fois de calculer la forme analytique du rendement ainsi que d'avoir accès à des profils expérimentaux, le sont pour la gravure du  $Si$  et du  $SiO_2$  dans un plasma de chlore. Étant donné que, pour des raisons didactiques, ce type de gravure est traité à la fin de ce chapitre, nous introduisons l'étude de la dépendance angulaire dans ce dernier paragraphe.

Comme nous l'avons vu dans le premier chapitre, cette dépendance est complexe et est fonction de nombreux paramètres comme la nature de l'ion incident (masse, énergie), du matériau cible considéré, de la pression opératoire, etc. D'une manière générale, pour la

gravure du silicium à basse pression, pour des plasmas d'argon, de chlore ou de mélange chlore/argon, et des ions incidents de faible énergie (de l'ordre de la centaine d'eV), le rendement est plus important pour des incidences voisines de la normale à la surface. Ce qui signifie que la quantité de matière retirée est importante si un ion arrive avec un angle près de la normale locale et diminue fortement lorsque cet angle augmente. Ceci est logique, car comme nous l'avons vu, dans le cas de la pulvérisation à basse énergie, les mécanismes les plus probables sont, soit l'éjection d'un atome cible de la surface lors d'une première collision, soit l'éjection d'un atome par collision avec l'atome cible. Si l'ion arrive avec une incidence rasante, l'énergie déposée sur la surface est faible et la quantité de mouvement transmise aux atomes de la surface n'est pas suffisante pour engendrer une éjection significative d'atomes. Ainsi, peu d'atomes sont retirés et l'ion est réfléchi.

La dépendance angulaire du rendement de pulvérisation est fonction de l'atome cible. Aussi, pour le platine dans l'argon, la dépendance angulaire du rendement de pulvérisation est similaire au silicium. Pour le  $SiO_2$ , elle est très différente. En effet, dans ce cas, pour des conditions opératoires identiques [16], la vitesse de gravure est d'environ 70 nm/min à une incidence normale et augmente pour atteindre un maximum d'environ 120 nm/min à 45 degrés par rapport à la normale, et rapidement diminuer rapidement pour atteindre environ 30 nm/min à 85 degrés. Chang *et al.*, ont mesuré la vitesse de gravure du  $SiO_2$  dans un mélange chlore/argon (90% de chlore et 10% d'argon) [44]. Le comportement observé est similaire à celui que nous venons de décrire, le rendement étant maximum pour un angle de 65 degrés (Fig. 3.16).

Pour illustrer l'importance de la dépendance angulaire du rendement de gravure, nous comparons les simulations de profils gravés dans  $Si$  et  $SiO_2$  avec un plasma de chlore. Dans ces deux simulations, la sélectivité est imposée (10 :1). Les rendements de gravure sont pondérés par un rendement relatif qui dépend de l'angle d'incidence conformément

à la figure 3.16. Les figures 3.17a) et 3.17b) représentent les rendements relatifs utilisés pour la gravure dans  $Si$  et dans  $SiO_2$  avec un plasma de chlore.

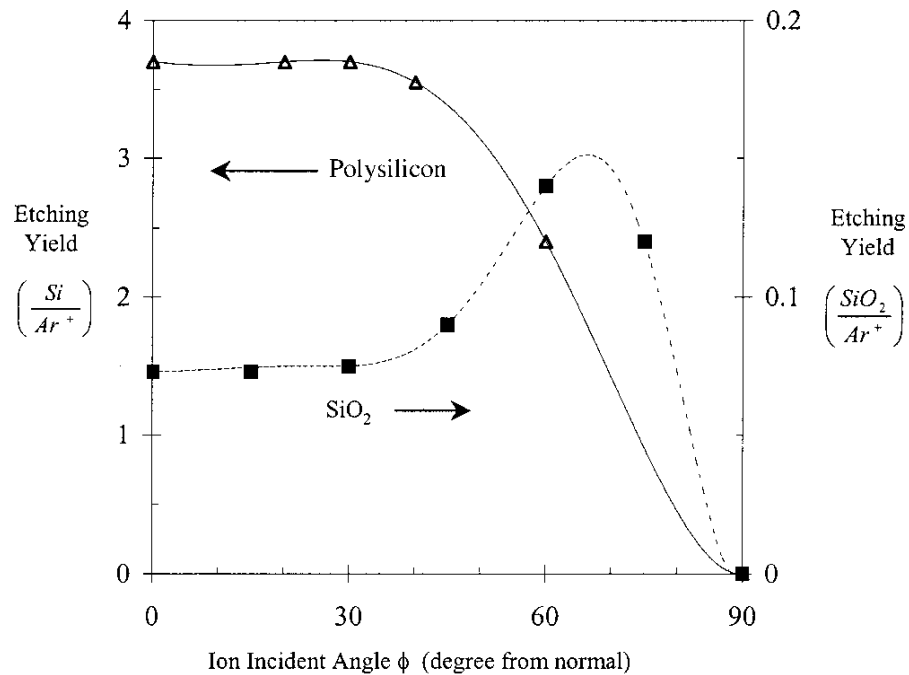


Figure 3.16 – Rendement de gravure en fonction de l'angle d'incidence de l'ion pour le  $SiO_2$  et le  $Si$  dans un plasma de chlore/argon. Le rendement diminue à partir d'une incidence de 40 degrés pour le  $Si$ . Pour le  $SiO_2$ , le rendement présente un maximum autour de 65 degrés [44].

Nous avons vu que, pour la gravure du  $Si$  dans un plasma de chlore, la grande majorité des ions dont l'incidence est supérieure à 80 degrés par rapport à la normale sont réfléchis. Afin de simuler la gravure d'un profil dans  $SiO_2$ , nous avons besoin de connaître l'angle d'incidence limite au delà duquel les ions sont réfléchis ; or cette donnée n'existe pas dans la littérature. Nous déterminons cet angle limite en comparant les rendements de gravure relatifs pour  $Si$  et  $SiO_2$  dans le chlore (Fig. 3.17a) et 3.17b)).

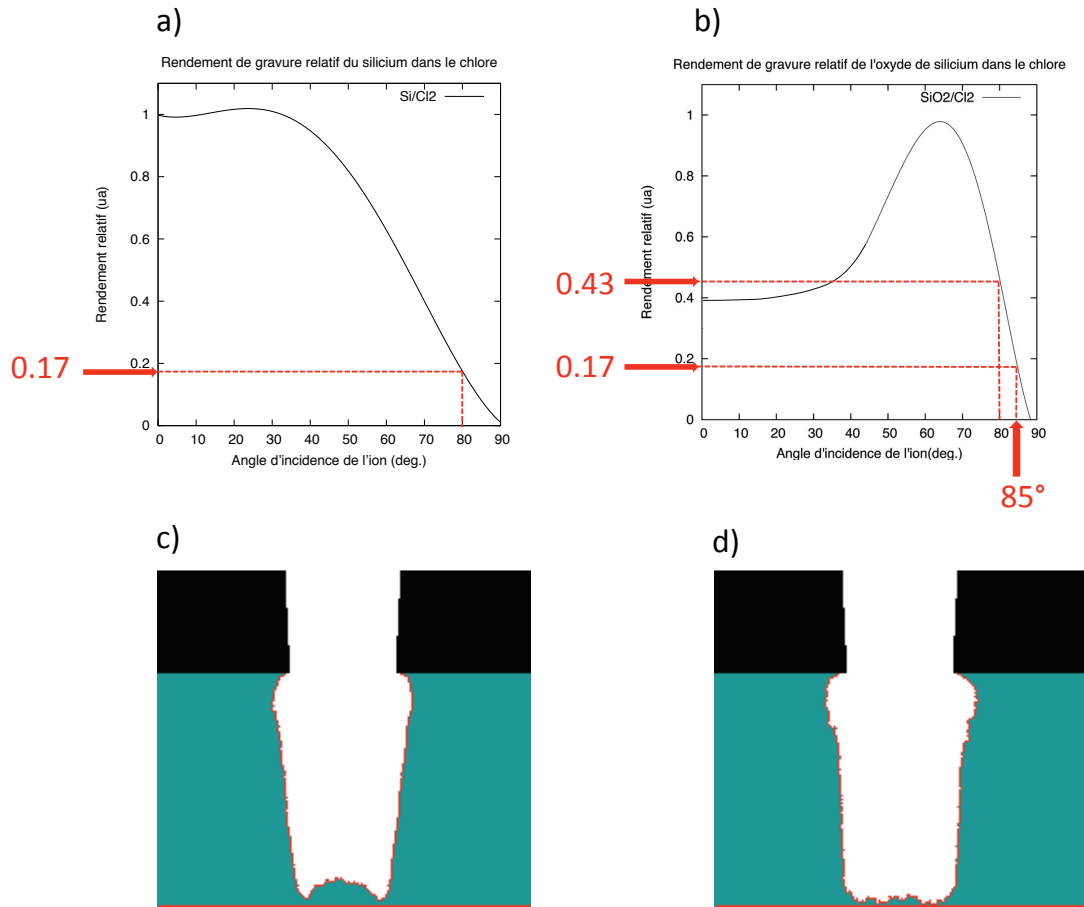


Figure 3.17 – Représentation des rendements relatifs utilisés pour nos simulations dans le chlore et profils de gravure correspondants. Pour le Si, les particules sont réfléchies au delà de 80 degrés, le rendement vaut alors 0.17 (a). Pour le SiO<sub>2</sub>, le rendement est encore important à 80 degrés (0.43); nous considérons alors que les ions sont réfléchis pour un angle supérieur à 85 degrés (b). La figure (d) présente une gravure sous-masque plus importante que sur (c). Les parois sont "protégées" du flux ionique par le masque, les micro-tranchées sont absentes.

D'après la figure 3.17a), à une incidence de 80 degrés (c'est-à-dire pour l'angle limite de réflexion des ions à incidence rasante sur  $Si$ ) correspond un rendement relatif d'environ 0.2. Nous choisissons donc que pour un rendement relatif inférieur ou égal à 0.2, un ion à incidence rasante va être réfléchi. On remarque que, dans le cas du  $SiO_2$ , le rendement de gravure relatif est important pour une incidence de 80 degrés : il vaut en effet environ 0.5 pour cet angle (Fig. 3.17b)). Ce qui signifie que l'angle limite pour la réflexion des ions à incidence rasante est supérieur à 80 degrés. Sur la figure 3.17b), à un rendement de 0.2, correspond un angle de 85 degrés. Nous faisons alors le choix que l'angle limite de réflexion pour les ions à incidence rasante sur  $SiO_2$  dans le chlore est 85 degrés.

Les deux simulations sont faites en considérant un plasma de chlore à une pression de 2 mTorr et pour un rapport de flux  $J_n/J_i = 22$ , c'est-à-dire les mêmes conditions que dans la section 3.3.1.2. La figure 3.17c) montre le résultat de la gravure du  $Si$  par un plasma de chlore, que nous avons détaillée précédemment (cf section 3.3.1.2). La figure 3.17d) représente le profil de gravure dans le  $SiO_2$  pour les mêmes conditions opératoires ; la seule différence étant la dépendance angulaire du rendement de gravure. À titre d'illustration, nous choisissons une sélectivité idéale et des masques identiques pour les deux matériaux. Ainsi, seul l'effet de la dépendance angulaire du rendement de gravure est mise en avant. Sur les deux profils, la gravure sous-masque est importante car ici le masque reste intact durant le processus de gravure, il n'est donc pas gravé latéralement. Ces deux profils présentent des différences évidentes puisque dans le  $SiO_2$  (Fig. 3.17d)), on remarque une gravure sous-masque plus importante, des parois bien verticales et une absence de micro-tranchées. Ces observations sont directement liées au fait que les ions à incidence rasante sont moins réfléchis (l'angle limite de réflexion étant plus grand pour le  $SiO_2$ ), ainsi plus d'ions vont graver les parois. De plus, l'importante gravure latérale "protège" les parois d'une exposition au flux ionique. Le nombre d'ions qui heurtent les parois avec une incidence rasante est donc moindre et les micro-tranchées ne se forment pas.



Ces observations confirment que la dépendance angulaire du rendement de gravure a des conséquences directes sur la forme de la tranchée. Elle est donc un paramètre extrêmement important pour le contrôle de la géométrie du profil de gravure.

### 3.4 Limite de validité du simulateur

Dans ce paragraphe, nous mettons en évidence les limites du simulateur en termes de dimensions des profils gravés. Pour cela, nous traitons de la taille minimale d'une cellule ainsi que du nombre minimal de cellules à considérer. Ces deux contraintes limitent ainsi la dimension de la largeur du motif gravé.

Nous avons vu, dans le paragraphe 2.3.1, que le meilleur compromis entre un temps de calcul raisonnable et une rugosité de surface réaliste est obtenu si le nombre initial d'atomes par cellule est égal à  $z$  fois le rendement de gravure "virtuel", avec  $z$  compris entre 5 et 10. C'est-à-dire que, d'un point de vue algorithmique, il faut idéalement un minimum de  $z$  ions incidents pour "vider" une cellule de ses atomes. Autrement dit, pour que le simulateur fonctionne correctement, il faut que chaque cellule contienne au minimum  $z$  atomes. Cette information impose une taille minimale des cellules ( $a_{min}$ ). Par exemple, comme la densité du *Si* est  $N_{Si} \approx 5 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ , il est possible de calculer  $a_{min}$  car on a  $N_{Si} a_{min}^3 = z$ , ce qui donne  $a_{min} \approx 0.46 \text{ nm}$  pour  $z = 5$ . Ce calcul simple définit la limite inférieure de la taille d'une cellule imposée par notre simulateur, celle-ci dépendant de la densité du matériau considéré. Cependant, cette limite est de taille relativement faible, de l'ordre d'un demi-nanomètre.

Afin de déterminer la limite de validité du code, nous avons simulé deux profils de 15 nm de largeur et de 56 nm de profondeur gravés dans *SiO<sub>2</sub>/Si* par un plasma de chlore (avec les mêmes conditions opératoires qu'au paragraphe 3.3.1.2). Pour ces si-

mulations, la taille de chaque cellule est de 1 nm (Fig. 3.18a)) et 0.5 nm (Fig. 3.18b)). Pour le profil 3.18a), la largeur utilisée est de 15 cellules, alors que pour le profil 3.18b), elle est de 30 cellules. Les deux profils sont donc de même taille mais le nombre de cellules définissant la largeur de la tranchée est différente. Or, on remarque que les formes diffèrent totalement. En effet, le profil 3.18a) présente une base arrondie, alors que celui de la figure 3.18b) présente des micro-tranchées. Nous allons voir que cette différence de représentation de profils de même dimension est liée à un comportement anormal du simulateur. Cette observation va nous permettre d'évaluer les dimensions limites des tranchées simulables.

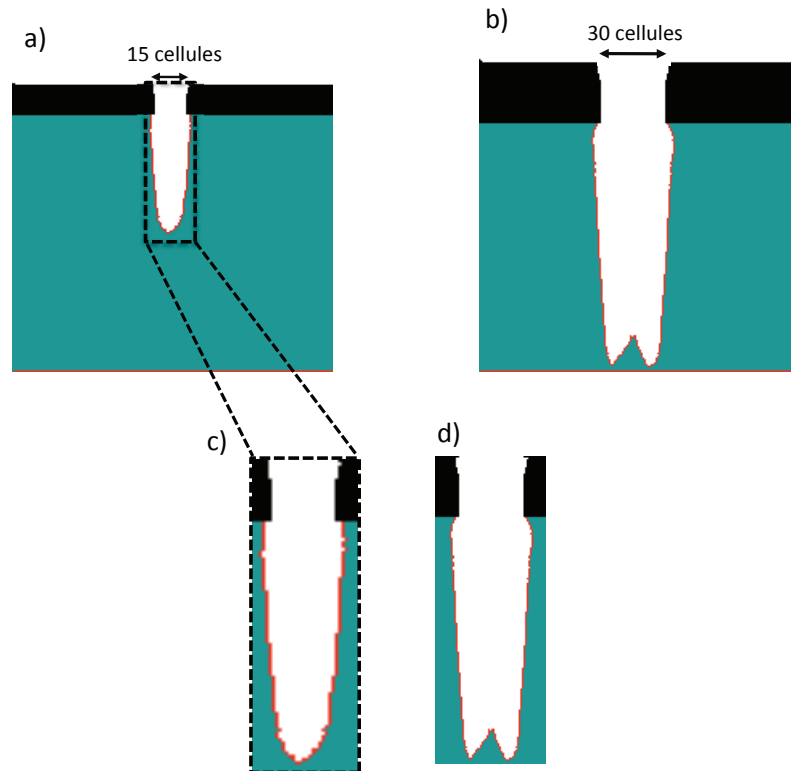


Figure 3.18 – Profil de gravure dans Si avec un plasma de chlore, largeur du motif 15 nm. a) Motif de 15 cellules de largeur (taille de chaque cellule : 1 nm). b) Motif de 30 cellules de largeur (0.5 nm). c) et d) agrandissements des profils. Il n'y a pas de micro-tranchées sur le motif de 15 cellules de largeur. Elles sont, par contre, présentes sur celui de 30 cellules.

Nous devons vérifier si des micro-tranchées sont observables pour les dimensions de

profils simulés plus haut et avec une distribution angulaire Gaussienne de LMH de 5 degrés pour les ions incidents. La présence de micro-tranchées est due à une focalisation des ions réfléchis depuis les parois verticales du matériau et du masque. En considérant les dimensions de la tranchée et l'angle d'incidence initial des ions, il est possible de déterminer la zone d'impact des ions réfléchis à la base de la tranchée. Cette zone d'impact est évaluée en déterminant le déplacement horizontal de l'ion incident. Dans le cas d'une distribution angulaire Gaussienne des ions incidents dont la LMH est de 5 degrés, les angles d'incidences des ions sont compris entre 0 et 4 degrés par rapport à la verticale. Avec cette distribution angulaire, pour un ion se déplaçant verticalement d'une distance  $p = 50 \text{ nm}$  (Fig. 3.19) dans le motif, son déplacement horizontal est  $x = p \tan(\gamma)$ , où  $\gamma$  est l'angle de réflexion par rapport à la verticale. C'est-à-dire, dans le cas présent, un déplacement horizontal  $x$  compris entre 0 et 8 nm depuis la paroi, pour un angle  $\gamma$  compris entre 0 et 4 degrés. Ce rapide calcul montre que, pour un motif de largeur 15 nm avec une Gaussienne de LMH de 5 degrés, les ions peuvent être réfléchis près de la paroi et donc former des micro-tranchées. L'absence de micro-tranchées sur le profil 3.18a) est donc une représentation erronée fournie par le simulateur.

Ce comportement anormal du simulateur est dû au fait que le nombre de cellules traitées pour le calcul de la normale locale est trop faible. En effet, comme nous l'avons vu dans le paragraphe 2.4.3, le calcul de la normale se fait en considérant les cellules voisines de la cellule cible dans un rayon de 10 cellules. Or la tranchée du profil 3.18a) ne présente que 15 cellules de surface. Dans ce cas, le calcul de la normale est alors incorrect et le profil simulé non réaliste. Ainsi, nous devons fixer un nombre minimal de cellules à traiter et donc, compte tenu de la taille limite de chaque cellule, une taille minimale des profils à simuler. Plusieurs tests révèlent que le nombre minimal de cellules définissant la largeur du motif est 25, les micro-tranchées n'étant plus représentées en dessous de cette limite. Il est donc impossible de simuler des profils dont la largeur est inférieure à  $25a_{min}$ , soit 11 nm dans  $Si$ , pour  $z = 5$ .

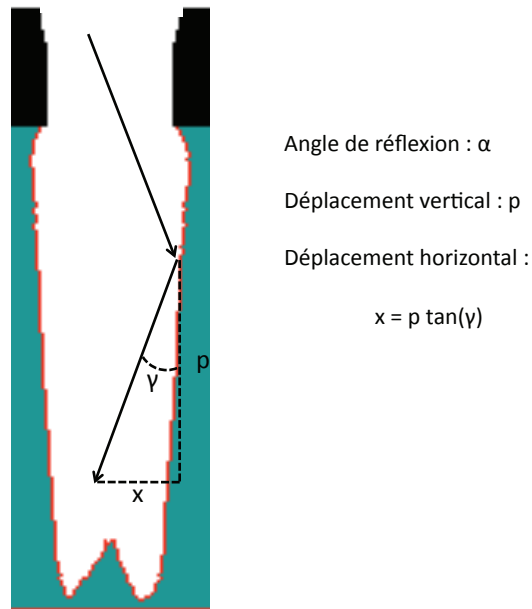


Figure 3.19 – Calcul du déplacement horizontal  $x$  d'un ion réfléchi depuis la paroi avec un angle  $\gamma$  par rapport à la verticale. Le déplacement vertical est  $p$ .

### 3.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons mis à profit notre simulateur pour étudier les paramètres qui interviennent lors de la réalisation de profils de gravure.

L'étude du cas de la pulvérisation simple a mis en évidence l'importance de la distribution angulaire des ions incidents, et par conséquent de la pression du plasma, sur la géométrie du profil. Nous avons aussi vu que l'interaction entre les ions et la surface est directement liée à cette distribution : selon leur angle d'incidence, les ions peuvent, soit pulvériser des atomes de surface, soit être réfléchis. Cette réflexion des ions est à l'origine de micro-tranchées à la base du profil. Nous avons également vu que cette réflexion sur la surface est non spéculaire et que la dispersion des ions autour de la direction spéculaire obéit à une loi en  $\cos^n$ . Dans le cas du *STO*, la valeur du paramètre  $n$  a été déterminé en comparant le profil simulé à un profil expérimental réalisé. Enfin, le bon accord des profils de gravure par pulvérisation expérimentaux et simulés dans *Si* et *STO*

nous a permis de valider le simulateur.

Le cas de la gravure chimique assistée par les ions a été étudié pour la gravure du silicium par un plasma de chlore. Nous avons vu l'importance de l'ajout de neutres sur la qualité des profils. En effet, le rapport de flux entre les neutres et les ions détermine la forme finale du profil de gravure. À une pression de 2 mTorr, un profil relativement anisotrope a été obtenu, avec une légère gravure sous-masque. C'est pour une pression plus élevée de 10 mTorr que la forme du profil change le plus. Dans ce cas, les parois deviennent concaves et la gravure sous-masque est plus importante. Ce comportement a été attribué aux neutres, dont la distribution angulaire est isotrope. Globalement, le simulateur reproduit bien les observations expérimentales, ce qui permet de le valider.

La comparaison des profils simulés pour la gravure dans  $Si$  et  $SiO_2$  par un plasma de chlore, nous a permis de mettre en évidence l'importance de la dépendance angulaire du rendement de gravure, notamment l'effet de cette dépendance angulaire sur la géométrie du profil. Nous avons également vu que, dans le cas du  $Si$  avec un plasma de chlore, notre simulateur surestime la gravure sous-masque. Ce phénomène peut être attribué au redépôt des particules pulvérisées. L'étude précise du redépôt fera l'objet du prochain chapitre. Enfin, nous avons montré les limites du simulateur en terme de largeur minimale du motif gravé. Cette taille limite dépend du matériau considéré et, pour la gravure de  $Si$ , nous avons montré que le simulateur est limité à un motif d'une largeur de 11 nm.

## CHAPITRE 4

### PULVÉRISATION DU PLATINE DANS L'ARGON : EFFET DE CHARGE ÉLECTRIQUE ET REDÉPÔT

Les métaux nobles comme le platine sont utilisés comme électrode pour la fabrication de mémoire RAM (*Random Access Memory*) de haute densité. Pour réaliser des ponts et des connecteurs à l'échelle sous-micrométrique, il faut avoir des tranchées profondes et surtout avec des parois bien verticales. Une fois de plus, réaliser des profils anisotropes dans ces métaux est essentiel.

La gravure du platine dans un plasma d'argon a déjà fait l'objet d'études dans notre laboratoire. Les profils expérimentaux obtenus présentent une géométrie inattendue. En effet, les parois des tranchées sont très inclinées, depuis le masque jusqu'à la base du profil. On parle de *profil en V*.

Des profils similaires ont été observés dans la littérature. Par exemple, Milkove et Wang ont observé des parois fortement inclinées lors de la gravure du platine dans un plasma de chlore à une pression de 11 mTorr [69]. D'après leur étude, deux processus expliquent de tel profils. Le premier est le redépôt de platine pulvérisé sur les parois, le deuxième, une gravure latérale excessive du masque. Cette dernière engendre un déplacement horizontal du masque pendant la gravure. Dans ce cas, la largeur de la tranchée du masque augmente durant le processus et la pente apparaît progressivement. Shibano *et al.* [70] ont également réalisé des profils dans le platine avec un mélange de gaz chlore-argon. Des parois inclinées sont aussi observées mais attribuées au redépôt uniquement.

Ce chapitre a pour objet de l'étude du profil en V obtenu expérimentalement dans le cas du platine gravé par un plasma d'argon. Nous utilisons notre simulateur afin d'ex-

plier cette géométrie particulière, ainsi que pour mettre en évidence les mécanismes fondamentaux qui entrent en jeu.

Tout d'abord, nous considérons le cas d'une gravure excessive du masque qui pourrait engendrer une inclinaison des parois durant le processus de gravure. Ensuite, nous proposons deux explications possibles pour expliquer cette géométrie particulière. La première est l'effet de l'accumulation de charges électriques sur le masque, la deuxième le redépôt du platine pulvérisé sur les parois en relation avec la pression. Dans le cas du redépôt, nous simulons la pulvérisation du platine pour des pressions opératoires différentes et nous comparons les résultats avec plusieurs profils expérimentaux. Enfin, nous justifions le fait d'avoir négligé le redépôt dans les simulations précédentes, notamment dans le cas de la réalisation de profils dans le silicium avec un plasma de chlore.

#### 4.1 Gravure excessive du masque : sélectivité et forme initiale du masque

Nous nous intéressons en premier lieu à la sélectivité et à la forme initiale du masque afin d'expliquer la géométrie particulière du profil obtenu lors de la gravure du platine par un plasma d'argon. Le masque utilisé est une résine de type HPR-504. L'image MEB (Fig. 4.1) réalisée par Delprat *et al.* [51] montre des parois fortement inclinées, le masque ayant été préalablement retiré.

Pour réaliser le profil de la figure 4.1, un plasma d'argon magnétisé de densité ionique  $n_{Ar^+} = 10^{11} \text{ cm}^{-3}$  est utilisé. Dans ce cas, l'absence de neutre réactif n'autorise que la pulvérisation simple du matériau. La pression opératoire est de 0.5 mTorr, ce qui fournit des ions incidents très directionnels avec une distribution angulaire Gaussienne étroite (LMH de 5 degrés). De plus, une tension RF est appliquée sur le substrat produisant une tension continue d'auto-polarisation de -100V qui accélère les ions vers la surface. Enfin, il faut noter que le masque présente initialement des parois inclinées de 75 degrés

par rapport à l'horizontale.

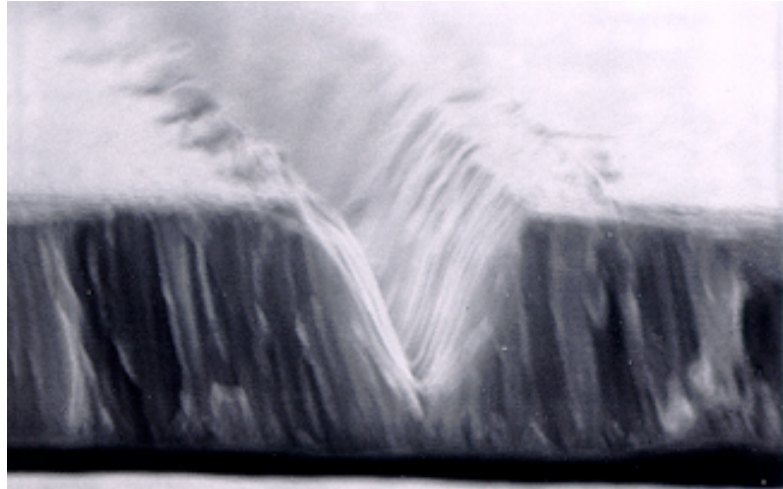


Figure 4.1 – Profil en V lors de la gravure du platine dans un plasma d'argon. La largeur de la tranchée est  $0.5 \mu\text{m}$ , et la profondeur de  $0.6 \mu\text{m}$ . Les parois présentent une pente importante d'environ  $60$  degrés par rapport à l'horizontale. D'après [51].

#### 4.1.1 Sélectivité

Nous nous intéressons ici à la sélectivité entre le platine et la résine HPR-504. En effet, une gravure latérale importante du masque peut engendrer un profil avec des parois inclinées. La figure 4.2 illustre cette possibilité. Ici, le masque, initialement incliné, subit une gravure latérale importante, ce qui engendre une "ouverture" de plus en plus grande de la tranchée. Ainsi, progressivement, des parois inclinées se forment. On parle de *récession* horizontale du masque.

Nous devons donc vérifier si, dans nos conditions de gravure, le masque est fortement érodé. Pour cela il faut comparer les vitesses de gravure du masque et du matériau, c'est-à-dire évaluer la sélectivité. D'après la figure 4.3, à  $0.5 \text{ mTorr}$ , les vitesses de gravure mesurées sont  $V_{\text{HPR-504}} = 300 \text{ \AA}/\text{min}$  pour le masque, et  $V_{\text{Pt}} = 1900 \text{ \AA}/\text{min}$  pour le platine. On a donc  $V_{\text{HPR-504}}/V_{\text{Pt}} = 0.16$ , c'est-à-dire une sélectivité Pt :HPR-504 d'environ 6 :1. Le platine est donc gravé 6 fois plus vite que la résine. Comme l'épaisseur ini-



tiale du masque est de  $1.1\mu m$  et que la profondeur de platine à la fin de la gravure est de  $0.6\mu m$ , on a seulement  $0.1\mu m$  de masque gravé. On peut donc dire que, dans ces conditions opératoires, le masque reste pratiquement intact pendant la gravure. Ainsi l'hypothèse d'une gravure excessive du masque, à l'origine de la géométrie observée, peut être rejetée.

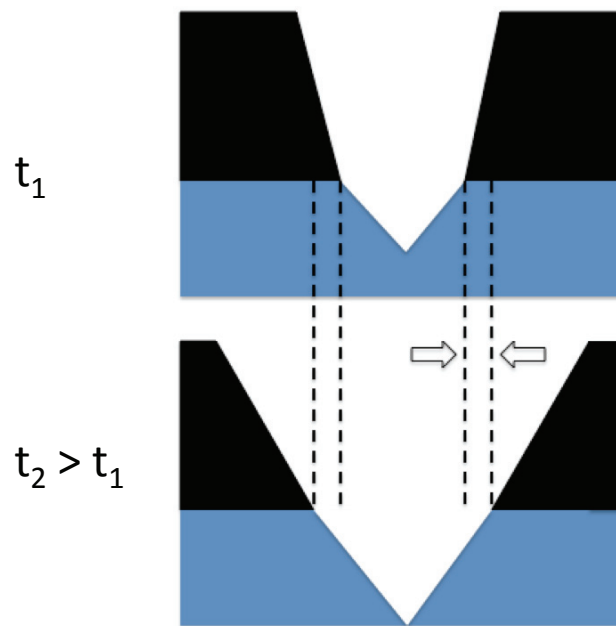


Figure 4.2 – Mécanisme de récession horizontale du masque. Si la vitesse de gravure horizontale du masque est importante alors, à l'instant  $t_2$ , le masque présente une "ouverture" plus importante qu'à l'instant  $t_1$  et des parois inclinées se forment progressivement. Les flèches représentent le déplacement horizontal du masque dû à une gravure latérale excessive.

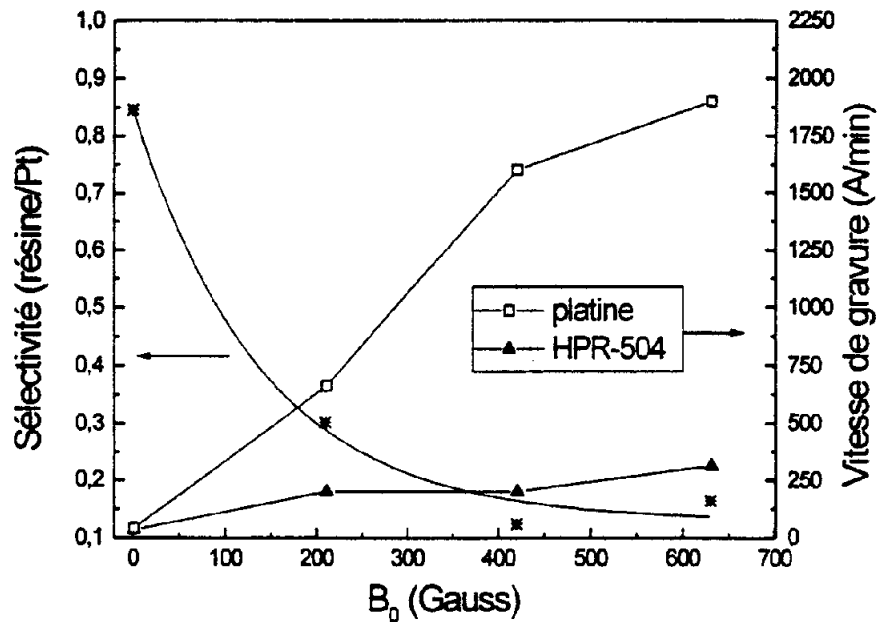


Figure 4.3 – Sélectivité et vitesse de gravure en fonction du champ magnétique. À 600 Gauss, la sélectivité est excellente, d'environ 0.16. D'après [71].

#### 4.1.2 Forme initiale du masque

Comme nous l'avons vu précédemment (paragraphe 3.1.4.1), la forme initiale du masque influe sur la géométrie du profil. Dans le cas qui nous intéresse, le masque présente des parois initialement inclinées de 75 degrés par rapport à l'horizontale, ce qui pourrait être à l'origine de la pente observée. Pour cela, nous avons simulé la gravure du profil en considérant un masque aux parois inclinées (Fig. 4.4). On voit que les parois de la tranchée sont verticales malgré la forme du masque. On peut donc en déduire que, dans ce cas précis, la pente initiale du masque n'est pas responsable de la forme du profil observée.

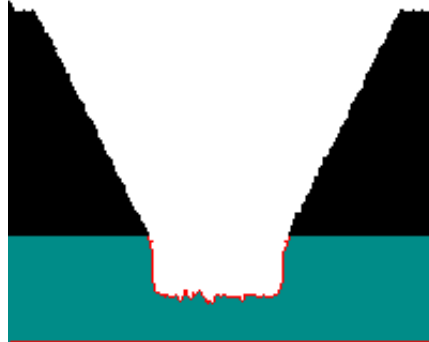


Figure 4.4 – *Simulation de la gravure du platine dans un plasma d'argon. La pente initiale du masque est de 75 degrés. Le profil simulé ne correspond pas au profil expérimental (Fig. 4.1).*

En comparant les vitesses de gravure du masque et du platine, nous avons donc pu rejeter l'hypothèse d'une gravure excessive du masque. De plus, la simulation (Fig. 4.4) montre que, malgré la pente initiale du masque, il n'est pas possible, ici, d'obtenir un profil en V. Nous proposons, dans le paragraphe suivant, une autre hypothèse, celle d'une accumulation de charges électriques sur le masque.

#### **4.2 Accumulation de charges électriques sur la surface du masque**

Dans ce paragraphe, nous nous intéressons à la nature isolante du masque. En effet, le masque considéré est une résine de polymère ayant la particularité d'être un très bon isolant. Celui-ci reçoit un flux d'ions  $Ar^+$  pendant tout le processus de gravure, les ions étant accélérés par une tension d'autopolarisation négative vers le substrat. On peut faire l'hypothèse d'un échange de charges entre l'ion incident et la surface du masque. En effet, l'accumulation de charges électriques due à un transfert de charges entre un ion incident et des atomes de surface est un phénomène couramment observé, plus particulièrement pour des énergies ioniques élevées [52] [53] [72] [73]. On peut s'attendre à ce que ce mécanisme soit également présent pour les énergies ioniques plus faibles utilisées en gravure. Dans ce cas, sous l'effet d'un flux d'ions positifs, des charges posi-

tives s'accumulent sur la surface du masque et un champ électrique perpendiculaire à la surface apparaît. Ce champ va alors dévier les trajectoires des ions incidents.

Murakawa *et al.* ont observé des déformations de profils de gravure dans le silicium attribuées à une accumulation de charges positives sur le masque isolant [74]. De plus, Economou et Alkire ont développé un modèle afin de décrire l'accumulation de charges sur la surface d'un polymère et les courants induits qui y apparaissent [43]. Il est donc tout à fait légitime de s'intéresser à ce phénomène dans notre cas.

Dans le paragraphe 1.3.2, nous avons montré que la gaine présente un champ électrostatique qui accélère les ions vers la surface du substrat. Cependant, ce champ reste faible dans nos conditions expérimentales et l'énergie des ions est alors souvent en dessous du seuil de pulvérisation du matériau. Afin d'augmenter l'énergie des ions, on polarise l'échantillon en appliquant une tension. Si l'échantillon est conducteur, on applique une tension continue. S'il est isolant (c'est le cas le plus commun car les masques utilisés sont soit des polymères, soit des diélectriques), alors on applique une tension radiofréquence (RF) afin que le champ électrique traverse la couche isolante et que le substrat soit polarisé. Dans le cas d'une polarisation RF, les ions positifs sont accélérés vers le substrat lorsque le potentiel est négatif et les électrons lorsque qu'il est positif. Cependant, la différence de mobilité entre les ions et les électrons va engendrer un décalage de la valeur moyenne du signal RF vers les tensions négatives. Ce décalage atteint rapidement une valeur constante qui compense la différence de mobilité entre les ions et les électrons. Cette tension d'autopolarisation continue assure l'accélération des ions positifs et la quasi-absence d'électrons sur la surface. Dans les conditions opératoires envisagées ici, la tension d'auto-polarisation est de -100V, ce qui assure une énergie suffisante aux ions  $Ar^+$  pour pulvériser le platine.

Nous avons simulé les trajectoires des ions incidents sur le substrat avec et sans échange de charges. La figure 4.5a) représente les trajectoires des ions incidents sans accumulation de charge électrique. Sur cette figure, on voit très bien que les trajectoires des ions sont rectilignes. On voit aussi les réflexions sur les parois du masque. Si on prend en compte l'accumulation de charges sur la surface du masque, on voit une déviation des ions positifs incidents (Fig. 4.5b)). Sur cette image, les trajectoires des ions sont courbes. Ceux-ci sont déviés vers le milieu de la tranchée et n'entrent plus en contact avec le masque.

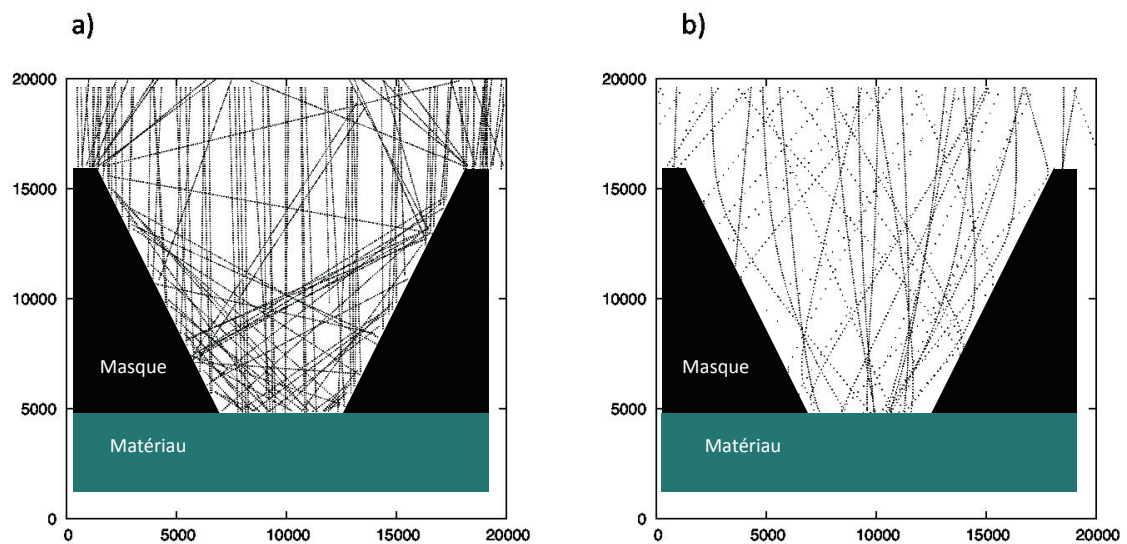


Figure 4.5 – Trajectoires des ions. a) Trajectoires des ions incidents sans accumulation de charges électriques sur la surface du masque. b) Déflexion des trajectoires des ions par le champ électrique perpendiculaire au masque.

Pour simuler l'accumulation de charges électriques sur la surface du masque, nous avons fait l'hypothèse qu'un ion  $Ar^+$  échange sa charge avec la surface selon une certaine probabilité  $p$ . Les figures 4.6a)-c) représentent les profils obtenus pour trois probabilités d'échange de charge différentes, à savoir  $p = 0.01$ ,  $p = 0.05$  et  $p = 1$ , respectivement. Pour ces trois probabilités, la pente obtenue est d'environ 60 degrés par rapport à l'horizontale, soit sensiblement la même que pour le profil expérimental. Cependant, la forme du profil change en fonction de la probabilité choisie. En effet, lorsqu'on augmente la

probabilité d'échange de charges, l'accumulation est alors plus importante, la surface se charge plus rapidement et par conséquent, le champ électrique agit plus tôt et de manière plus intense. Les ions incidents sont alors davantage déviés et donc focalisés vers le milieu du profil. Ainsi, plus la probabilité augmente, plus la paroi devient convexe. À partir de  $p = 0.05$ , une forme en "entonnoir" apparaît qui s'accroît à  $p = 1$ . De plus, on remarque, qu'au delà de  $p = 0.05$ , une gravure sous-masque est visible, or ce dernier point est absent du profil expérimental. Le meilleur accord entre profils expérimental et simulé est donc obtenu avec une probabilité d'échange de charge égale à 0.01.

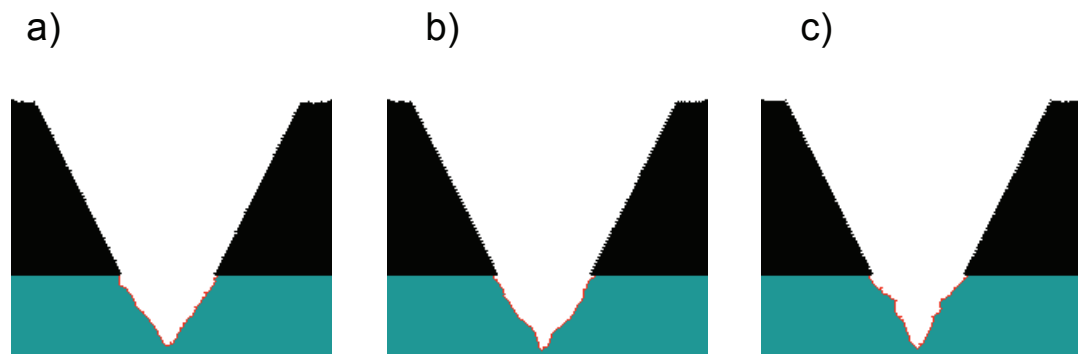


Figure 4.6 – Profil de gravure dans le platine avec un plasma d'argon. La figure a) est la meilleure représentation du profil expérimental, avec une probabilité d'échange de charge de 0.01. Les figures b) et c) sont obtenues avec  $p = 0.05$  et  $p = 1$ , respectivement ; une forme en "entonnoir" apparaît ainsi qu'une gravure sous masque absente sur le profil expérimental. Dans les trois cas, la pente de la paroi est d'environ 60 degrés par rapport à l'horizontale, soit sensiblement identique à celle du profil expérimental (Fig. 4.1).

Ces résultats indiquent une probabilité d'échange de charge *a priori* faible. Or, on s'attendrait à ce que la majorité des ions échangent leur charge avec la surface, c'est-à-dire que la probabilité soit plus proche de 1. Cette probabilité dépend de la masse et de l'énergie de l'ion incident, ainsi que de la structure moléculaire de la surface du masque. Or, celle-ci peut évoluer sous l'influence du flux ionique. En effet, Végh *et al.* [75] ont étudié numériquement l'effet du bombardement d'ion  $Ar^+$  à 100 eV sur du polystyrène à l'aide de simulations de dynamique moléculaire. Ils ont montré que la structure de la

surface est modifiée durant le bombardement et qu'une couche ressemblant à du carbone amorphe (*amorphous-carbon-like*) se forme. Cette modification de la surface change ses propriétés électriques et peut éventuellement la rendre conductrice.

Il est donc difficile d'évaluer la probabilité d'échange de charge entre l'ion et la surface de la résine pour les faibles énergies considérées. Une modification de la structure de la surface sous l'effet du flux d'ions peut expliquer le bon accord entre les profils simulés et expérimentaux lorsque la probabilité d'échange de charge est faible, mais il est impossible d'aller plus loin que le constat. Ce résultat suggère également que l'accumulation de charges électriques sur le masque n'est pas nécessairement un mécanisme déterminant dans les conditions opératoires envisagées. De plus, il faut noter que ce phénomène n'est pas considéré dans le chapitre précédent, bien que les profils simulés et expérimentaux soient en très bon accord lors de la gravure dans  $SiO_2/Si$  par un plasma de chlore à 2 mTorr, ce qui démontre que la prise en compte de l'accumulation de charges n'est pas indispensable pour décrire un certain nombre de résultats.

Dans ce paragraphe, nous avons proposé une hypothèse pour expliquer la forme particulière observée lors de la pulvérisation du platine par les ions d'argon. Nous avons vu que la déviation des trajectoires des ions incidents à l'approche de la surface du masque, due à une accumulation de charges électriques, peut expliquer cette forme en V. Cependant, cette hypothèse repose sur une faible probabilité d'échange de charge entre les ions et la surface qui nous semble peu crédible. Par ailleurs, les propriétés électriques de cette surface évoluent de façon incertaine sous l'action du flux ionique. C'est pourquoi, sans exclure totalement cette explication, nous croyons qu'elle pourrait entrer en compétition avec une autre hypothèse, liée au redépôt de matière pulvérisée.

### 4.3 Redépôt des espèces pulvérisées

Au chapitre 3, nous n'avons pas tenu compte du redépôt des espèces pulvérisées pour deux raisons. En effet, dans le cas de la pulvérisation du *Si* dans l'argon, notre but était de pouvoir isoler les mécanismes qui entrent en jeu lors de la gravure et de détailler leurs conséquences sur la forme du profil. En second lieu, pour la gravure du *Si* dans le chlore, selon Gupta *et al.* [65], le coefficient de collage du  $SiCl_4$  sur le *Si* est très faible. Cependant, nous avons observé que la simulation surestime la gravure sous-masque dans le cas du *Si* avec du chlore à 10 mTorr. Nous avons attribué cette différence entre profil simulé et expérimental à un éventuel redépôt. Nous allons donc voir dans ce chapitre, qu'à la pression utilisée, le redépôt peut devenir significatif.

Dans un premier temps, nous nous intéressons encore à la pulvérisation du platine dans un plasma d'argon. Nous traitons le redépôt pour deux pressions opératoires distinctes (une très basse, 0.1 mTorr, et une plus élevée, 10 mTorr). Le fait de considérer ces deux cas nous permettra de préciser les deux types de redépôt qui entrent en jeu. De plus, nous détaillons les mécanismes d'éjection des atomes pulvérisés et montrons comment nous les introduisons dans le simulateur. Dans un deuxième temps, nous revenons sur les profils réalisés dans le silicium avec un plasma de chlore.

#### 4.3.1 Deux types de redépôt

Les deux images prises au MEB de la figure 4.7 sont des profils gravés dans le platine avec un plasma d'argon pour 0.1 et 10 mTorr. Sur ces images, on remarque qu'à 0.1 mTorr, le profil présente une paroi inclinée ainsi qu'une petite quantité de platine redéposée à la jonction entre le masque et le matériau. À 10 mTorr, le profil est différent, la paroi est plus inclinée et on voit très clairement qu'une quantité importante de platine est redéposée sur les parois du masque.



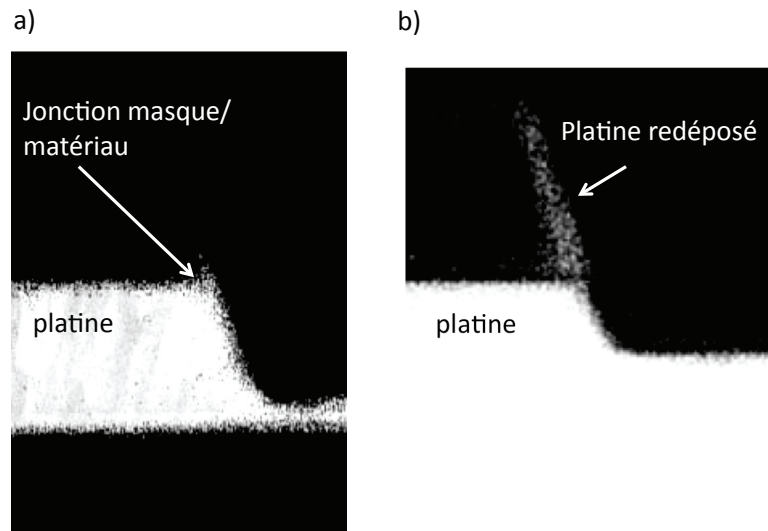


Figure 4.7 – Image MEB de profils de gravure dans le platine avec un plasma d’argon. a) À 0.1 mTorr, on observe une paroi inclinée et un faible redépôt à la jonction masque-matériau. La profondeur de platine est de 0.4  $\mu\text{m}$ . b) À 10 mTorr, la pente est plus importante, de même que le redépôt sur le masque. La profondeur de platine est de 0.2  $\mu\text{m}$ . D’après [76].

La figure 4.7 met en évidence le lien étroit entre pression opératoire et redépôt. Delprat *et al.* [76] ont montré que le redépôt de platine est très faible pour une pression de 0.1 mTorr et qu’il augmente très fortement au delà de 7 mTorr. C’est à partir de cette observation que Stafford *et al.* [41] ont fait l’hypothèse de deux types de redépôt pour expliquer le lien entre redépôt et pression opératoire, à savoir le redépôt direct où un ion pulvérise un atome de la surface qui va ensuite se coller directement sur la surface du matériau ou du masque, et le redépôt indirect, où l’atome pulvérisé quitte la surface, est réinjecté dans le plasma où il entre en collision et revient sur la surface du substrat.

Dans le cas du redépôt indirect, une particule pulvérisée qui quitte le motif pour rejoindre le plasma peut revenir vers le substrat selon une certaine probabilité. Cette probabilité de retour (RR) vers le substrat a été évaluée par Stafford *et al.* [41] en fonction de la pression. À 0.1 mTorr,  $RR=0.05$  et à 10 mTorr,  $RR=0.9$ . Il existe alors une compétition entre ces deux types de redépôt qui interviennent simultanément, mais à des degrés différents.

En effet, à basse pression, le redépôt direct est dominant et lorsque la pression augmente, le redépôt indirect croît de sorte que les deux processus agissent simultanément et dans les mêmes proportions. Nous allons donc voir comment on peut tenir compte de ces deux types de redépôt dans le simulateur.

### **4.3.2 Distribution angulaire des atomes pulvérisés**

Tout d'abord, nous devons préciser quelle est la distribution angulaire des atomes pulvérisés car elle est directement liée à la géométrie du profil. En effet, lorsqu'un ion incident arrive sur une cellule de l'interface plasma-matériau, le produit pulvérisé quitte la surface selon un certain angle et peut se coller directement sur une surface (masque ou matériau). La position de la cellule cible qui reçoit ce produit est directement liée à cet angle. Pour déterminer cette cellule cible, il faut donc connaître l'angle d'éjection des produits de pulvérisation, c'est-à-dire leur distribution angulaire. C'est cette distribution qui va définir la localisation du collage des particules pulvérisées et qui va ainsi être déterminante pour la géométrie du profil gravé.

La plupart des simulateurs de profil de gravure traitant du redépôt des particules pulvérisées font l'hypothèse d'une distribution angulaire suivant une loi en cosinus, c'est-à-dire que les particules sont considérées comme éjectées dans toutes les directions, quel que soit l'angle d'incidence de l'ion. Mais cette hypothèse est erronée car, comme nous allons le voir, la distribution angulaire dépend précisément de l'angle d'incidence de l'ion. Pour cela, nous envisageons deux cas distincts : les ions arrivant à incidence normale sur la surface à pulvériser, et ceux dont l'incidence est oblique.

#### **4.3.2.1 Ion à incidence normale**

De nombreuses études ont caractérisé la dispersion angulaire des particules pulvérisées, mais pour des énergies bien supérieures à celles que nous envisageons ( $>1$  keV). Pour les énergies plus faibles qui nous intéressent, la littérature se fait plus rare. De plus, le

lien entre l'énergie incidente et le mécanisme d'éjection des particules est complexe.

Lorsque l'énergie de l'ion est de l'ordre de 1 keV, le phénomène de cascade de pulvérisation démontré par la théorie de Sigmund [11] décrit convenablement la distribution angulaire des particules pulvérisées. Le nombre de collisions entre les atomes de surface, qui sont engendrées par l'impact de l'ion incident, est suffisamment grand pour rendre aléatoire la direction des atomes éjectés. Ici, les atomes de surface, frappés par l'ion incident, entrent en collision dans toutes les directions et la distribution des atomes éjectés suit alors une loi en cosinus. La nature aléatoire de l'angle d'éjection fait que l'information sur l'angle d'incidence initial est perdue. Ainsi, pour des énergies de l'ordre de 1 keV, la distribution angulaire suit une loi en cosinus, quel que soit l'angle d'incidence de l'ion.

Pour des énergies plus faibles ( $< 1$  keV), la distribution dépend de l'angle d'incidence de l'ion. La forme de la distribution est alors différente si l'ion arrive avec une incidence oblique ou normale. À incidence normale, elle s'éloigne de la distribution en cosinus et on observe alors une émission à des angles plus "rasants", c'est-à-dire avec des angles importants par rapport à la normale. On parle dans ce cas de distribution en "sous-cosinus" [77] c'est-à-dire en forme de coeur.

Les travaux de Wherner et Rosenberg sur la pulvérisation du platine montrent que la distribution angulaire des atomes pulvérisés suit bien une loi en sous-cosinus pour des ions  $Hg^+$  entre 100 eV et 1 keV [78]. Ils observent une émission dans une direction privilégiée autour de 45 degrés. Leur étude portant sur des cristaux, on s'attend alors à ce que la direction privilégiée soit orientée selon un axe particulier dans le réseau cristallin. Or, dans nos simulations, les matériaux considérés sont polycristallins ou amorphes, c'est-à-dire qu'ils sont soit constitués de réseaux polycristallins disposés de manière aléatoire, soit qu'il n'y a pas du tout de structure cristalline.

Malgré le caractère amorphe des matériaux que nous étudions (par exemple, une couche mince de platine réalisée par dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma - PECVD pour *Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition*), on observe une direction privilégiée des atomes pulvérisés suivant une loi en sous-cosinus [79] [80]. Cette distribution s'explique par le fait que les collisions entre les atomes du matériau, engendrées par l'ion incident, sont trop peu nombreuses pour rendre aléatoire l'angle de sortie de l'atome éjecté. Dans ce cas de figure, on parle de pulvérisation en régime de "poussage" (*knockon regime*) : la collision entre l'ion incident et les atomes du matériau se fait à une faible profondeur, l'ion entrant en collision avec un atome de la surface et ce dernier "pousse" un atome voisin de la surface. C'est ce voisin qui va être éjecté : on est dans le cas d'une émission secondaire (Fig. 4.8) selon un angle rasant.

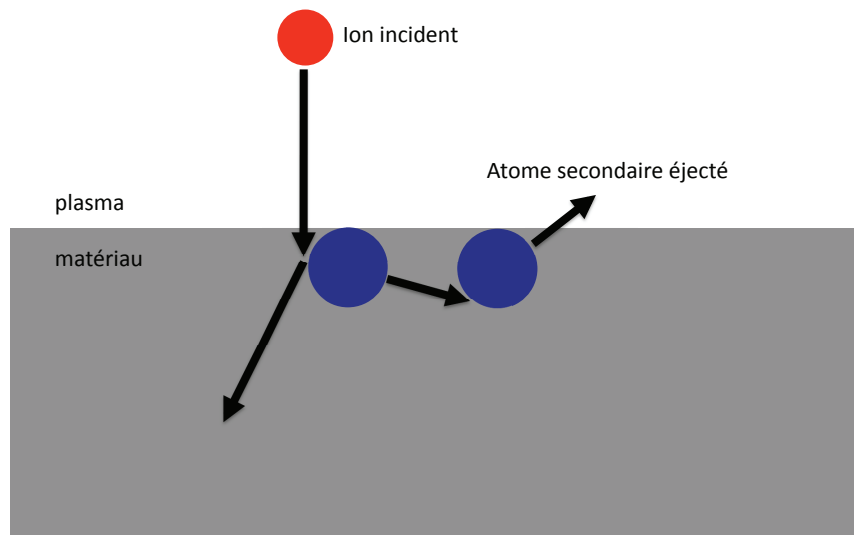


Figure 4.8 – Éjection d'un atome secondaire. L'ion incident heurte un atome de surface. Celui-ci "pousse" un atome secondaire qui est éjecté selon un angle rasant.

Cette émission d'atomes pulvérisés selon une direction privilégiée a été étudiée. En effet, les simulations de Kawakami *et al.* [80], pour la pulvérisation à incidence normale d'une surface métallique, montrent que pour des énergies de 300 eV à 1 keV, la distribution angulaire des particules pulvérisées suit bien une loi en cosinus ; pour des énergies

supérieures à 1 keV, c'est une loi en "sur-cosinus" (c'est-à-dire de préférence dans la direction de la normale à la surface) et pour une énergie de 100 eV, c'est une loi en "sous-cosinus". Stepanova et Dew [79] ont développé un modèle analytique afin d'estimer le rendement de pulvérisation. D'après leur étude numérique, la distribution angulaire des atomes pulvérisés suit bien une loi en sous-cosinus lorsque l'énergie de l'ion incident diminue (Fig. 4.9). Nous avons pris en compte cette forme de la distribution angulaire des atomes éjectés dans le simulateur, l'angle d'éjection privilégié étant à déterminer.

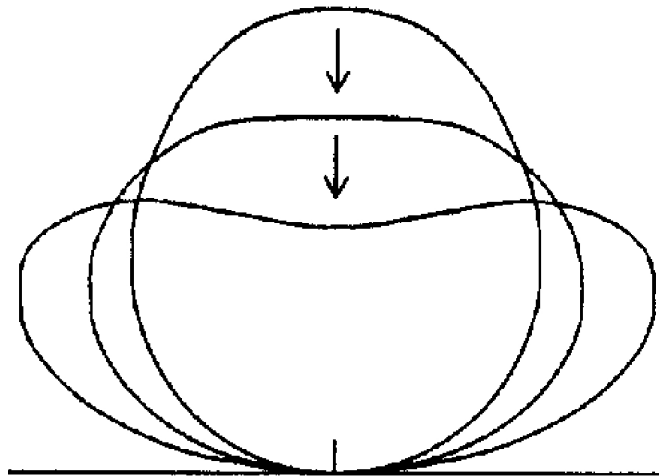


Figure 4.9 – *Distribution angulaire en sous-cosinus pour des atomes pulvérisés par un ion à incidence normale. Si l'énergie de l'ion diminue (indiquée par la flèche descendante), la distribution "s'écrase". D'après [79].*

#### 4.3.2.2 Ion à incidence oblique

Nous allons voir que pour un ion à incidence oblique, la distribution angulaire des particules pulvérisées suit également une direction privilégiée directement liée à l'angle d'incidence. Comme précédemment, dans le cas d'une structure cristalline, on s'attend à une direction privilégiée pour l'émission des atomes pulvérisés. Stepanova et Dew [81] ont simulé la distribution angulaire d'atomes de titane pulvérisés par des ions d'argon à 600 eV pour différents angles d'incidence. Tel qu'attendu dans ce régime d'énergie, la

distribution suit une loi en cosinus pour une incidence normale. Mais lorsque l'incidence augmente de 20 à 60 degrés, les auteurs observent une direction privilégiée autour de 30 degrés pour l'émission d'atomes pulvérisés. De même, pour des ions  $Hg^+$  à incidence oblique pulvérisant du nickel, à une énergie de 250 eV, Whener et Rosenberg ont mesuré un angle d'émission de 40 degrés par rapport à la normale, et de 45 degrés pour du molybdène [78]. Ainsi, lors de la pulvérisation d'une structure cristalline, un angle d'émission privilégié est observé, mais il n'est pas lié à l'angle d'incidence.

Dans notre cas, l'arrangement désordonné des atomes des couches amorphes que nous pulvérisons nous permet de supposer que les atomes pulvérisés vont quitter la surface dans la direction spéculaire définie par l'angle d'incidence de l'ion, avec cependant une certaine dispersion autour de cet angle de sortie.

Les données expérimentales de Franke *et al.* [82] dans le cas de surfaces amorphes de titane et de nitrure de bore, pulvérisées par des ions d'argon et de krypton, pour des énergies de 20 à 1200 eV, corroborent notre hypothèse. En effet, avec un angle d'incidence de 30 degrés, le maximum d'émission a été obtenu pour un angle de sortie de 33 degrés, avec une dispersion angulaire maximale de  $\pm 25$  degrés, ce résultat étant confirmé par une simulation réalisée à l'aide du logiciel TRIM [83]. Cette observation nous conduit à considérer une dispersion en  $\cos^n$  autour de la direction spéculaire définie par l'angle d'incidence de l'ion. Dans les simulations, une valeur  $n = 100$  correspond à une dispersion maximale de  $\pm 25$  degrés.

### **4.3.3 Simulation du redépôt direct et indirect**

#### **4.3.3.1 Redépôt direct**

Nous venons de détailler les mécanismes d'éjection des particules pulvérisées. Leur distribution angulaire dépend de l'angle d'incidence de l'ion et est très différente d'une

distribution en cosinus. Il est donc fondamental de connaître la direction privilégiée d'éjection des atomes pulvérisés par un ion arrivant, soit à incidence normale, soit à une incidence oblique.

Dans le cas d'une incidence oblique, nous considérons que l'éjection se fait dans la direction spéculaire avec une dispersion angulaire autour de cette direction. Cette hypothèse semble logique pour la pulvérisation de matériaux amorphes. Dans le cas d'une incidence normale à la surface, il faut déterminer la direction d'éjection privilégiée. Outre la distribution angulaire des atomes éjectés, un autre paramètre est indispensable, c'est la probabilité de collage des atomes de platine pulvérisés sur le masque. En effet, une fois que l'angle de sortie de l'atome pulvérisé est connu, celui-ci va suivre une trajectoire rectiligne. Dans le cas du redépôt direct, il va se déplacer jusqu'à une cellule cible et s'y coller selon la probabilité de collage associée à cette cellule. Cette probabilité dépend de la nature de la surface et de celle de l'atome. On s'attend à ce qu'un atome de platine pulvérisé ait une probabilité de collage de 1 sur du platine (collage platine-platine). Par contre, un atome de platine sur la surface du masque en résine (collage platine-masque) a une probabilité de collage certainement plus faible [84], que nous devons évaluer.

#### ***4.3.3.2 Redépôt indirect***

Dans le cas du redépôt indirect, à partir du moment où l'angle de l'atome pulvérisé est défini, s'il quitte le motif, c'est-à-dire le haut du domaine de simulation, soit il est réinjecté dans le domaine, soit il est perdu, ce choix se faisant en fonction de la probabilité de retour choisie en fonction de la pression. De plus, les atomes qui retournent dans le plasma subissent des collisions. Si l'atome revient dans le domaine, comme il a subi des collisions dans le plasma proche, on lui attribue un angle d'incidence défini par une distribution angulaire suivant une loi en cosinus.

### 4.3.4 Simulation du redépôt lors de la pulvérisation du platine dans l'argon

Pour illustrer l'effet du redépôt direct et indirect sur la géométrie du profil, nous considérons deux cas particuliers. Dans un premier temps, la pression envisagée est de 0.1 mTorr, ce qui nous permet de négliger le redépôt indirect ( $RR=0.05$ ). Dans ce cas, seul le redépôt direct est simulé. Par comparaison avec les observations expérimentales, nous pouvons en déduire la distribution angulaire des particules éjectées ainsi que la probabilité de collage platine-masque. Dans un deuxième temps, la pression est de 10 mTorr et les deux mécanismes de redépôt sont pris en compte ( $RR=0.9$ ). Dans ces deux cas, les ions d'argon ont une énergie de 100 eV, la densité d'ions est de  $10^{11} \text{ cm}^{-3}$  et les LMH sont de 5 et 13 degrés pour des pressions de 0.1 et 10 mTorr, respectivement.

#### 4.3.4.1 Redépôt direct

La figure 4.10a) est une image MEB du profil dans le platine pour une pression de 0.1 mTorr. Le masque y est encore présent. Initialement, à cause de la qualité limitée de la lithographie, la paroi du masque est inclinée de 75 degrés par rapport à l'horizontale [76]. Le profil après gravure présente une pente de 70 degrés et, comme nous l'avons précisé au paragraphe 4.3.1, on remarque une légère accumulation de platine à la jonction entre le masque et le matériau.

Dans le cas du redépôt direct, nous avons deux paramètres à déterminer, soit la probabilité de collage platine-masque et la direction d'éjection des atomes pulvérisés pour un ion arrivant à incidence normale. Comme nous l'avons précisé plus haut (paragraphe 4.3.2.2), dans le cas d'un ion à incidence oblique, cette éjection se fait autour de la direction spéculaire avec un maximum de dispersion de  $\pm 25$  degrés. Dans la première simulation (Fig. 4.10b), nous faisons le choix d'un angle d'éjection de 50 degrés par rapport à la normale, avec une dispersion angulaire maximale de  $\pm 25$  degrés. Nous fai-



sons l'hypothèse qu'un atome de platine se colle sur le masque avec une probabilité de 1 (collage platine-masque). Dans ces conditions, on voit sur l'image 4.10b) une quantité importante de platine redéposée sur la surface du masque, alors que l'image MEB 4.10a) ne présente pas un tel redépôt. Ceci indique que nous avons surestimé la probabilité de collage platine-masque. Après plusieurs tests, nous avons déterminé que le meilleur accord entre profil expérimental et simulé est obtenu pour une probabilité de collage platine-masque de 0.1.

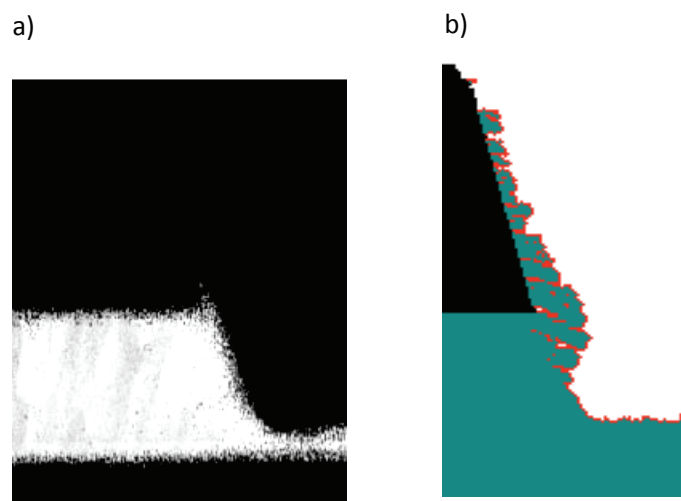


Figure 4.10 – Profil de gravure dans le platine avec un plasma d'argon. a) Sur l'image MEB, on observe une paroi inclinée et peu de redépôt sur la surface du masque. b) Profil simulé avec un angle d'éjection privilégié de 50 degrés pour les ions à incidence normale et une probabilité de collage platine-masque de 1. Le redépôt est largement surestimé.

Sur la figure 4.11 sont présentés plusieurs profils avec une probabilité de collage platine-masque de 0.1, mais pour différents angles d'éjection. Pour les images 4.11a), 4.11b) et 4.11d), l'angle d'éjection privilégié est de 40, 45 et 50 degrés par rapport à la normale locale avec une dispersion angulaire maximale de  $\pm 25$  degrés. Les profils correspondant aux angles d'éjection de 40 et 45 degrés présentent des parois moins inclinées (75 et 80 degrés par rapport à l'horizontale, respectivement) que celles du profil expérimental (Fig. 4.11c)) et très peu de platine est redéposé sur la surface du masque. L'image 4.11d)

présente une pente plus proche de celle du profil expérimental (environ 70 degrés) avec un redépôt plus important, notamment près de la jonction entre le masque et la platine. Clairement, ce profil calculé présente une bonne similitude avec le profil expérimental. On peut donc en déduire qu'un angle privilégié de 50 degrés ( $\pm 25$  degrés maximum) par rapport à la normale associé à une probabilité de collage platine-masque de 0.1 semblent être les paramètres les plus appropriés.

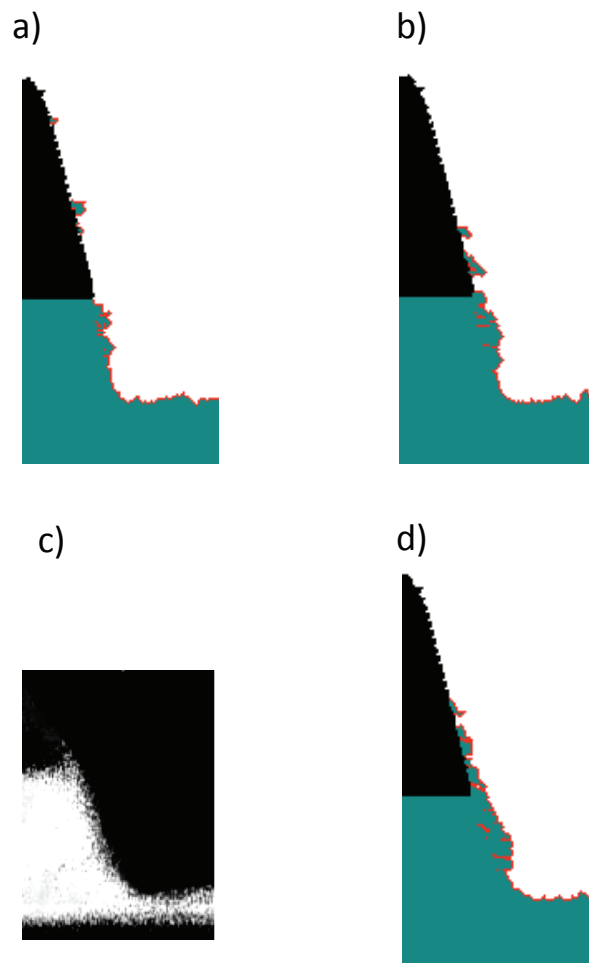


Figure 4.11 – Profils simulés pour différents angle d'éjection des atomes pulvérisés par les ions à incidence normale. a) Angle d'éjection de 40 degrés : pente d'environ 75 degrés par rapport à l'horizontale. b) Angle de 45 degrés : pente d'environ 80 degrés. c) Profil expérimental : pente d'environ 70 degrés. d) Angle de 50 degrés : profil le plus conforme au profil expérimental, pente d'environ 70 degrés.

On remarque cependant un changement de pente abrupt à la base du profil simulé (Fig. 4.11d) ) plus marquée que sur le profil expérimental. Il est possible que certains atomes de surface subissent d'infimes déplacements (de l'ordre de quelques cellules) contribuant à "adoucir" la pente. Par exemple, lorsqu'un atome est éjecté de la surface, il pourrait déplacer légèrement un voisin. Tous ces "micro-déplacements" pourraient être à l'origine de la pente moins abrupte observée à la base du profil expérimental. Cet hypothétique mécanisme de réarrangement des atomes sur la surface n'est pas pris en compte dans notre simulateur. Malgré tout, le résultat de la simulation est satisfaisant. Par la suite, nous utiliserons une direction d'éjection privilégiée de 50 degrés associée à une probabilité de collage de 0.1.

#### ***4.3.4.2 Redépôt direct et indirect***

Comme nous l'avons précisé dans le paragraphe 4.3.1, pour une pression de 10 mTorr, nous considérons que les atomes pulvérisés qui quittent le domaine de simulation reviennent vers le motif avec une probabilité de 0.9. Nous nous plaçons, comme précédemment, dans le cas d'un angle d'éjection de 50 degrés par rapport à la normale pour les ions arrivant à incidence normale et avec des probabilités de collage platine-masque de 0.1 et platine-platine de 1. Quant à la direction d'éjection des atomes pulvérisés à incidence oblique, elle demeure dispersée autour de la direction spéculaire.

Dans ces conditions, le profil simulé (Fig. 4.12b)) présente une importante quantité d'atomes redéposés sur la surface du masque ainsi qu'une paroi de platine inclinée d'environ 65 degrés par rapport à l'horizontale, conforme au profil expérimental (Fig. 4.12a)).

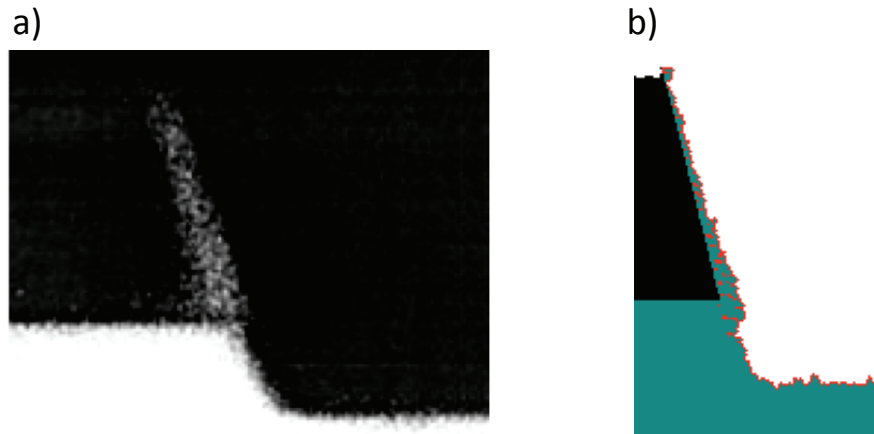


Figure 4.12 – Profil de gravure dans le platine à une pression de 10 mTorr. a) Le profil expérimental présentant une quantité importante d'atomes redéposés sur la surface du masque. b) Le profil simulé est en bon accord avec le profil expérimental. La pente de la paroi (environ 65 degrés par rapport à l'horizontale) et la quantité de platine redéposée sur le masque sont conformes aux observations.

#### 4.3.4.3 Profil en V

Les calculs exposés dans les deux paragraphes précédents nous ont permis de déterminer la distribution angulaire des atomes pulvérisés ainsi que la probabilité de collage des atomes de platine sur la surface du masque. Si ces paramètres sont corrects, ils devraient permettre de reproduire le profil en V obtenu à 1 mTorr (Fig. 4.13a)). La Fig. 4.13b) est le résultat de la simulation pour un angle d'éjection des atomes pulvérisés de 50 degrés par rapport à la normale tel que déterminé au paragraphe 4.3.4.1. Effectivement la Fig. 4.13b) montre une bonne similitude avec les observations. La Fig. 4.13c) est le résultat de la simulation avec un angle d'éjection des atomes pulvérisés de 40 degrés. En comparaison, ce profil calculé est beaucoup moins satisfaisant.

Ce résultat confirme donc que le choix du couple de paramètres unique évalué plus haut (éjection à 50 degrés et probabilité de collage platine-masque de 0.1) est conforme à la réalité. On remarque enfin que les profils simulés présentent une surface relativement rugueuse, aspect que l'on peut également constater sur le profil expérimental.

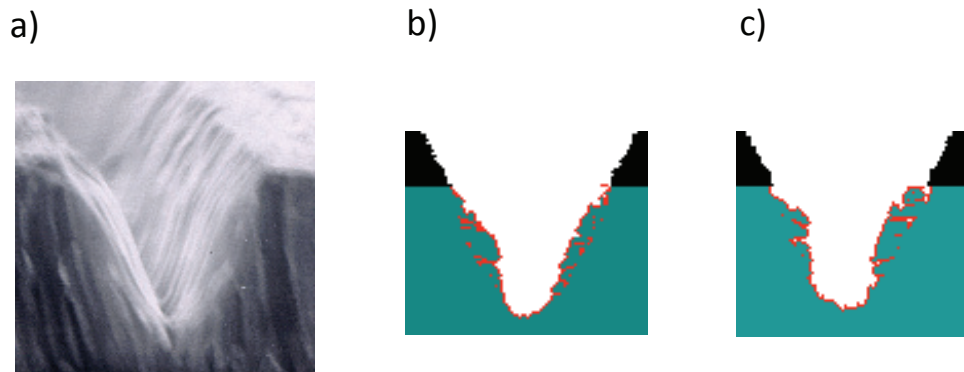


Figure 4.13 – Profil de gravure en V dans le platine. a) Profil expérimental : pentes d'environ 60 degrés. b) Profil simulé avec un angle d'éjection des atomes pulvérisés par les ions à incidence normale de 50 degrés : pentes conformes d'environ 60 degrés. c) Profil simulé avec un angle de 40 degrés : beaucoup moins satisfaisant.

#### 4.3.5 Effet du redépôt pour la gravure de *Si* dans un plasma de chlore

Au chapitre 3, pour la gravure de *Si* dans un plasma de chlore, nous avons choisi de ne pas tenir compte du redépôt. Pour justifier ce choix, nous nous étions reposé sur le fait que le produit pulvérisé ( $SiCl_4$ ) a une probabilité de collage sur *Si* extrêmement faible dans nos conditions opératoires, comprise entre 0.1 et 0.3 [65]. Afin de vérifier la validité de cette hypothèse, nous reprenons ici les simulations des paragraphes 3.3.1.2 et 3.3.1.3 en tenant compte du redépôt.

##### 4.3.5.1 Cas à basse pression (2 mTorr)

L'étude que nous venons de détailler, dans le cadre de la pulvérisation du platine dans un plasma d'argon, montre que le redépôt est un paramètre déterminant sur la géométrie du profil. L'importance de la quantité de matière redéposée est liée à deux paramètres fondamentaux, à savoir, la probabilité de collage des atomes pulvérisés sur le matériau gravé et le masque, et la pression opératoire. Nous avons vu qu'à basse pression le redépôt direct est dominant, la probabilité de retour du plasma des espèces pulvérisées étant très faible. Étant donné que, dans le cas de la gravure de *Si* dans un plasma de chlore, le produit volatil  $SiCl_4$  a une probabilité de collage sur *Si* très faible

et, qu'à basse pression, la probabilité de retour de  $SiCl_4$  est également faible, on s'attend à ce que le redépôt soit négligeable à 2 mTorr.

Notre objectif est, ici, de simuler le profil de gravure de  $Si$  avec un masque de  $SiO_2$  dans un plasma de chlore en tenant compte des paramètres relatifs au redépôt. En accord avec les résultats précédents, nous considérons ici que les particules ( $SiCl_4$ ) sont éjectées de la surface selon un angle autour de la direction spéculaire (direction spéculaire de  $\pm 25$  degrés maximum) pour les ions à incidence oblique et dans la direction privilégiée de 50 degrés  $\pm 25$  degrés par rapport à la normale, pour les ions arrivant perpendiculairement à la surface. Les données de la littérature nous donnant une probabilité de collage de  $SiCl_4$  sur  $Si$  comprise entre 0.1 et 0.3 [65], nous simulons ici le cas particulier pour une probabilité de 0.2. De plus, nous faisons l'hypothèse que la probabilité de collage de  $SiCl_4$  sur  $SiO_2$  est encore plus faible, soit 0.1. Enfin, à 2 mTorr, la probabilité de retour de  $SiCl_4$  depuis le plasma est de 0.1.

La Fig. 4.14b) présente le profil calculé pour une probabilité de collage de  $SiCl_4$  sur  $Si$  et sur  $SiO_2$  de 0.2 et 0.1, respectivement. Ce profil est quasi-identique à celui obtenu dans les mêmes conditions opératoires mais en négligeant le redépôt (Fig. 4.14a)). L'accord entre le profil calculé (Fig. 4.14b)) et le profil expérimental (Fig. 4.14c)) est très bon.

Ce résultat montre que le redépôt de matière pulvérisée n'est pas déterminant dans le cas de la gravure du  $Si$  dans un plasma de chlore à basse pression ( $\leq 2$  mTorr). Ainsi, l'hypothèse, faite dans le chapitre 3, de négliger le redépôt à cette pression est tout à fait satisfaisante. De plus, nous avons ainsi quantifié la probabilité de collage de  $SiCl_4$  sur  $Si$  et  $SiO_2$ , à savoir 0.2 et 0.1, respectivement.

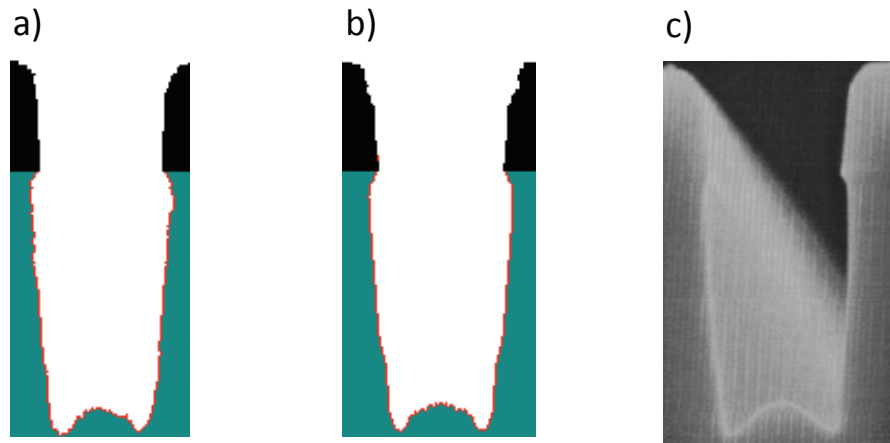


Figure 4.14 – Simulation du redépôt pour du *Si* gravé avec un plasma de chlore à 2 mTorr. a) Profil simulé en négligeant le redépôt (comme au paragraphe 3.3.1.2). b) Profil simulé en tenant compte du redépôt avec une probabilité de collage de  $\text{SiCl}_4$  de 0.2 sur *Si* et 0.1 sur  $\text{SiO}_2$ . La probabilité de retour des espèces pulvérisées est 0.1. c) Profil expérimental, d'après [66].

#### 4.3.5.2 Cas à haute pression (10 mTorr)

L'étude de la gravure du platine par un plasma d'argon faite au paragraphe 4.3.4.2 a mis en évidence, que pour une pression supérieure à 10 mTorr, le redépôt indirect devient important. À cette pression, les deux mécanismes de redépôt (direct et indirect) agissent simultanément car la probabilité de retour du plasma des espèces pulvérisées est importante. De plus, dans le paragraphe 3.3.1.3, nous avons observé une gravure sous-masque surestimée par le simulateur pour la gravure de *Si* dans un plasma de chlore. Nous avons attribué ce défaut au fait d'avoir négligé de redépôt de matière pulvérisée sur les parois du profil.

Dans ce paragraphe, nous reprenons la simulation de la gravure de *Si* avec un masque de  $\text{SiO}_2$  dans un plasma de chlore et pour une pression de 10 mTorr. À cette pression, la probabilité de retour des espèces pulvérisées est de 0.9. À la vue du résultat obtenu dans le paragraphe précédent, nous considérons une probabilité de collage de  $\text{SiCl}_4$  sur *Si* et  $\text{SiO}_2$  de 0.2 et 0.1, respectivement. À titre d'illustration, nous présentons aussi un profil

simulé pour des probabilités de collage plus faibles, à savoir 0.1 et 0.05.

La figure 4.15 présente les profils simulés pour ces probabilités de collage. Le profil 4.15b) est le résultat de simulation avec une probabilité de collage de 0.1 sur *Si* et de 0.05 sur *SiO<sub>2</sub>*. Dans ce cas, le profil simulé est quasi-identique à celui ne tenant pas compte du redépôt (Fig. 4.15a)), c'est-à-dire que la gravure latérale reste surestimée. Les probabilités de collage de *SiCl<sub>4</sub>* sur *Si* et *SiO<sub>2</sub>* choisies sont alors trop faibles. Le profil 4.15c) est calculé avec des probabilités de collage de 0.2 et 0.1 sur *Si* et *SiO<sub>2</sub>*. On remarque alors un léger redépôt sur les parois du masque (*SiO<sub>2</sub>*) ainsi qu'une légère gravure sous-masque très comparable à celle du profil expérimental (Fig. 4.15d)). De plus, dans ce cas, le profil simulé présente des parois bombées en très bon accord avec l'expérience.

Ce résultat confirme les valeurs des probabilités de collage de *SiCl<sub>4</sub>* déterminées dans le paragraphe précédent, à savoir 0.2 sur *Si* et 0.1 sur *SiO<sub>2</sub>*. De plus, le point à souligner ici est que ce résultat confirme l'importance du redépôt à 10 mTorr. Comme dans le cas de la pulvérisation du platine, la géométrie du profil gravé est fortement affectée par le redépôt à haute pression. Donc, malgré des probabilités de collages faibles, l'hypothèse de négliger le redépôt est alors totalement erronée à haute pression ( $\geq 10$  mTorr).



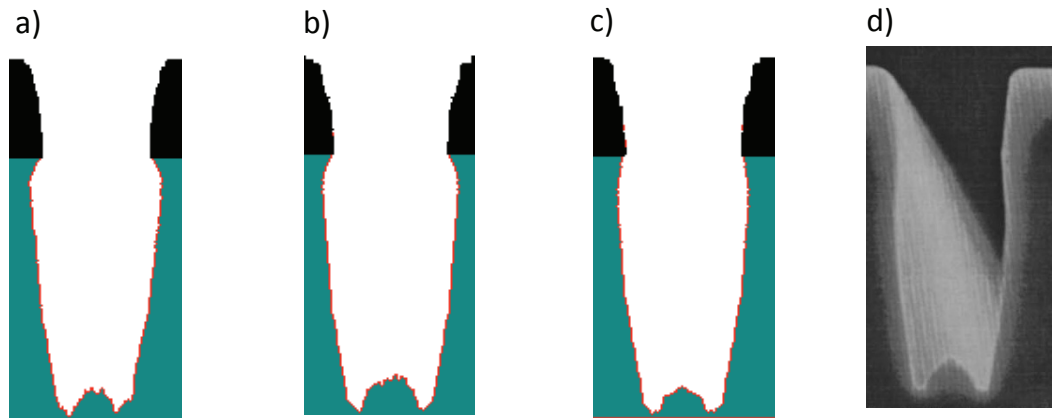


Figure 4.15 – Simulation du redépôt pour la gravure du Si avec un masque de  $\text{SiO}_2$  dans un plasma de chlore à 10 mTorr. a) Profil simulé sans tenir compte du redépôt (comme au paragraphe 3.3.1.3). b) Profil simulé avec une probabilité de collage de  $\text{SiCl}_4$  de 0.1 sur Si et 0.05 sur  $\text{SiO}_2$ . c) Profil simulé avec les probabilités de collage de 0.2 et 0.1 sur Si et  $\text{SiO}_2$  : très bon accord avec le profil expérimental. d) Profil expérimental, d'après [66].

#### 4.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié la pulvérisation du platine avec un plasma d'argon. Nous avons proposé plusieurs hypothèses afin d'expliquer les profils en V observés expérimentalement. Une gravure excessive du masque a rapidement été écartée grâce aux vitesses de gravure qui montrent une très bonne sélectivité de la gravure du masque par rapport au matériau. De même, la simulation montre que, dans ce cas précis, la forme initiale du masque n'est pas à l'origine de la forme en V du profil observée. L'accumulation de charges électriques positives sur la surface du masque permet d'expliquer les parois fortement inclinées. Cependant, le meilleur accord entre profils expérimental et simulé est obtenu en considérant une faible probabilité d'échange de charge entre les ions incidents et la surface du masque de résine. Cette faible probabilité d'échange de charge, qui semble *a priori* peu réaliste, nous a conduit à considérer le phénomène de redépôt d'atomes de platine pulvérisés sur les parois du motif. Or, tenir compte du redépôt demande de connaître la distribution angulaire des particules pulvérisées ainsi

que leur probabilité de collage sur la surface du masque. Deux types de mécanismes de redépôt, ainsi que l'éjection des atomes de la surface sous l'effet des ions incidents, ont été étudiés.

Notre analyse a été mise à profit pour reproduire les profils en V obtenus dans le platine. Les comparaisons entre profils simulés et expérimentaux nous ont permis de comprendre en détail les mécanismes d'éjection des particules pulvérisées. Nous avons montré que, pour des ions à incidence normale ayant une énergie de 100 eV, la distribution angulaire des atomes éjectés suit une loi en sous-cosinus avec un angle d'éjection privilégié de 50 degrés par rapport à la normale avec une dispersion angulaire maximum de  $\pm 25$  degrés autour de cette direction. Nous avons également montré que pour les ions à incidence oblique, l'éjection des atomes pulvérisés se fait dans la direction spéculaire avec une dispersion angulaire maximum de  $\pm 25$  degrés autour de cette direction. De plus, ces études nous ont permis de quantifier la probabilité de collage des atomes de platine pulvérisés sur la surface du masque en résine, une probabilité de 0.1 offrant le meilleur accord entre profils expérimentaux et simulés. Ces résultats nous ont amené à reconsidérer le cas de la gravure de *Si* dans un plasma de chlore. Ainsi, nous avons pu confirmer que le redépôt de matière pulvérisée est négligeable à basse pression, mais qu'il devient important à une pression élevée. En particulier, à 10 mTorr, nous avons montré que le redépôt de *SiCl<sub>4</sub>* sur les parois de *Si* limite la gravure latérale et donc la gravure sous-masque. Dans ce cas également, les comparaisons entre profils simulés et expérimentaux nous ont permis de déterminer les probabilités de collage de *SiCl<sub>4</sub>* sur *Si* et *SiO<sub>2</sub>*, à savoir des probabilités de 0.2 et 0.1, respectivement, ces probabilités de collage étant parfaitement conformes à nos attentes.

## CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Les exigences actuelles et futures en termes de réduction des dimensions des dispositifs en micro-électronique, en photonique ou dans bien d'autres domaines imposent la mise en place de nouveaux procédés de fabrication. Le coût de développement de ces procédés peut-être largement réduit s'il est possible de diminuer le nombre d'expériences en laboratoire de mise au point du procédé. Les simulations numériques ont alors un double avantage. Elle permettent d'une part, de donner un aperçu du résultat associé à un ou plusieurs paramètres expérimentaux ; d'autre part, elles offrent la possibilité de mieux comprendre les mécanismes fondamentaux qui entrent en jeu. Il est alors possible de mieux cibler les expériences. Le travail rapporté dans cette thèse s'inscrit parfaitement dans ce cadre. Le simulateur que nous avons développé permet de mieux comprendre les mécanismes physico-chimiques lors de la gravure par plasma de motifs dans divers matériaux avec des plasmas à haute densité et basse pression. Il offre aussi la possibilité de prédire l'évolution de la forme de ces profils en fonction des paramètres du plasma.

Dans le premier chapitre, nous avons introduit les concepts fondamentaux de la gravure par plasma indispensables pour élaborer un simulateur réaliste. Les différents types de gravure et le vocabulaire associé ont été détaillés. Nous avons également mis en évidence l'intérêt de simuler les profils de gravure et proposé un état des lieux des différentes approches existantes pour simuler l'évolution spatio-temporelle des profils. L'exposé des principales méthodes de simulation nous a permis de justifier notre choix de l'approche cellulaire, notamment quant à son réalisme et son adaptabilité.

Le deuxième chapitre a fait l'objet d'une description précise de l'algorithme que nous avons développé. Nous avons insisté sur le lien entre les concepts physiques et les modèles proposés. Nous avons notamment précisé comment tenir compte de l'aspect aléatoire de certains paramètres, comme le choix de l'angle d'incidence initial des par-

ticules via les distributions angulaire, le choix entre réflexion des ions ou gravure, le choix entre redépôt ou pas selon la probabilité de collage, etc. L'indépendance des ions et des neutres a été justifiée par les basses pressions considérées et nous avons montré l'aspect réaliste de la discrétisation en cellules carrées représentant des éléments de matière de quelques nanomètres. Ce chapitre résume en quelques pages la partie reliée au développement du code, bien que ce soit ce travail qui a consommé le plus de temps durant cette thèse. En effet, la mise au point de l'algorithme a demandé de nombreux tests et vérifications afin que les concepts et les mécanismes simulés soient cohérents et conformes à la réalité.

Le troisième chapitre présente la validation du code, la description des mécanismes mis en jeu lors de gravure de profils et un aperçu des limites de notre simulateur. Dans un premier temps, les mécanismes fondamentaux ont été étudiés à partir d'hypothèses justifiées par la suite. L'étude de la pulvérisation de *Si* par un plasma d'argon a permis d'étudier l'interaction ion-matériau et de mettre en évidence le phénomène de micro-tranchées. Le lien entre la pression du gaz et la distribution angulaire des ions incidents a été détaillé. Le rôle de l'étape de lithographie a été examiné en montrant l'effet de la forme initiale du masque sur la géométrie du profil. Enfin, le bon accord entre profils simulés et expérimentaux lors de la gravure de *STO* par un plasma d'argon a validé le bon fonctionnement du simulateur dans le cadre de la pulvérisation. Dans un deuxième temps, nous avons étudié la gravure chimique assistée par les ions de  $SiO_2/Si$  dans le chlore. Les simulations à basse pression montrent un très bon accord avec les profils expérimentaux. Nous avons étudié l'effet de l'action combinée des ions et des neutres et ses conséquences sur la forme du profil, à savoir la formation de micro-tranchées, de parois concaves, de "facettes" sur le masque, et la gravure sous-masque. Nous avons également montré l'importance de la dépendance angulaire du rendement de gravure sur la géométrie du profil. De plus, la surestimation de la gravure latérale par le simulateur nous a conduit à remettre en cause l'hypothèse de négliger le redépôt des parti-

cules pulvérisées lorsque la pression croît. Enfin, nous avons montré que les contraintes numériques limitent le simulateur à des profils d'une largeur supérieure à 11 nm. À partir de l'état des lieux précis des mécanismes intervenant lors de la gravure de profils par plasma, l'ensemble des hypothèses utilisées a pu être confirmées grâce à la comparaison entre profils simulés et expérimentaux.

Le dernier chapitre a été consacré à l'étude de la pulvérisation du platine dans un plasma d'argon. La validation du simulateur pour des conditions opératoires diverses nous a conduit à l'utiliser afin de comprendre les mécanismes à l'origine des profils en V observés expérimentalement. À partir de l'étude des vitesses de gravure, nous avons rejeté l'hypothèse d'une gravure excessive du masque qui pourrait être à l'origine de tels profils. Cependant, deux autres mécanismes peuvent être invoqués. Le premier consiste en une accumulation de charges électriques sur la surface du masque. Les profils simulés présentent alors des parois inclinées. Cependant, la probabilité d'échange de charge entre les ions et les atomes de la surface s'avère *a priori* faible, ce qui nous a conduit à envisager une autre explication, soit le redépôt d'atomes pulvérisés. Pour étudier son influence, nous avons détaillé comment et dans quelle direction un atome est éjecté de la surface sous l'effet d'un ion incident. Les simulations nous ont permis d'examiner les hypothèses de redépôt direct et indirect et d'accéder aux paramètres clés du redépôt comme la distribution angulaire des atomes éjectés et le coefficient de collage des espèces pulvérisées. Les résultats obtenus au terme de cette étude sur le redépôt sont d'un grand intérêt. En effet, dans la littérature, il n'existe que peu d'informations sur ces mécanismes et les simulations reposent sur des hypothèses parfois incorrectes, notamment en ce qui a trait à la forme de la distribution angulaire des atomes éjectés.

Ce dernier chapitre ouvre la voie à de nouvelles études. En effet, il serait intéressant de confronter les résultats de simulations avec des profils expérimentaux dont la forme du masque serait spécialement adaptée à l'étude du redépôt. On peut penser notam-

ment à des masques en "T" qui permettraient d'identifier le lieu de collage des espèces pulvérisées, et donc, de déterminer avec précision la distribution angulaire de ces espèces pour diverses conditions opératoires. Par la même occasion, cette étude apporterait des précisions sur la probabilité de retour des espèces pulvérisées à partir du plasma proche, plus particulièrement pour des pressions intermédiaires (entre 1 et 10 mTorr). De plus, alors que notre étude porte sur le redépôt de particules pulvérisées à partir de couches minces amorphes, il serait intéressant d'étudier le cas de matériaux présentant une structure cristalline.

D'autre part, l'étude de la déviation des ions incidents liée à la présence d'un champ électrique perpendiculaire au masque reste imprécise. En effet, le choix de ne traiter que la cellule de surface du masque la plus proche est une approximation importante. Une bonne évaluation de cette déviation impose une détermination précise du champ électrique créé par l'accumulation de charges sur le masque. Afin de déterminer ce champ, il faut résoudre l'équation de Poisson. Il serait alors possible d'évaluer avec précision la quantité de charges accumulées ainsi que l'erreur faite par notre approximation.

Enfin, une étude pour améliorer la précision du simulateur serait utile. En effet, nous avons vu l'importance de la distribution angulaire des ions sur la géométrie du profil. Dans notre cas, la largeur à mi-hauteur de la distribution angulaire Gaussienne des ions incidents est issue de la littérature, mais celle-ci reste relativement imprécise car nous n'avons accès qu'à des plages de valeurs des LMH, ces valeurs dépendant de la pression et du gaz utilisé. Il serait par conséquent utile de réaliser un code permettant de modéliser cette distribution en fonction de la pression et de la nature du plasma. Le couplage avec le présent simulateur serait particulièrement intéressant.

## BIBLIOGRAPHIE

- [1] *Loi de Moore*, [http://en.wikipedia.org/wiki/Moore%27s\\_law](http://en.wikipedia.org/wiki/Moore%27s_law).
- [2] *Intel*, <http://www.intel.com/pressroom/archive/releases/20060125comp.htm>
- [3] T. C. Penn, *IEEE Trans. Electron Dev.* **ED-26**(4) (1979) 640.
- [4] O. A. Popov, *High density plasma sources*, Noyes Publications, Park Ridge, New Jersey (1992).
- [5] M. A Lieberman et A. J. Lichtenberg, *Principles of Plasma Discharges and Material Processing* Second Edition, Willey (2005) p3.
- [6] L. Desvrouvres, L. Vallier, et O. Joubert, *J. Vac. Sci. Technol. B* **18**(1) (2000) 156.
- [7] O. Langlois, L. Stafford, J. Margot, et M. Chaker, *Appl. Phys. Lett.* **87** (2005) 131503.
- [8] J. W. Coburn et H. F. Winters, *J. Vac. Sci. Technol.* **16**(2) (1979) 391.
- [9] J. W. Coburn, *Plasma Chemistry and Plasma Processing* **2**(1) (1982).
- [10] D. L. Flamm, *Pure and Appl. Chem.* **62**(9) (1990) 1709-1720.
- [11] P. Sigmund, *Phys. Rev.* **184**(2) (1969) 383. *Plasma Processing of Semiconductors*, NATO ASI Series **336** (1996) 53.
- [12] J. P. Chang *et al*, *J. Vac. Sci. Technol.* **A15**(4) (2002) 1853.
- [13] S. Tachi et S. Okudaira, *J. Vac. Sci. Technol.* **B4** (1986) 459.
- [14] H. Gnaser, R. Behrisch, W. Eckstein (Eds.) : *Sputtering by Particle Bombardment*, *Topics Appl. Physics* **110** (2007) 231-328.

- [15] J. P. Chang, A. P. Mahorowala, et H. H. Sawin, *J. Vac. Sci. Technol. A* **16** (1998) 217.
- [16] M. U. Gutsche, S. D. Athavale, K. Williams, et D. Hines, *J. Vac. Sci. Technol. B* **18**(2) (2000) 765.
- [17] S. A. Vitale, H. Chae, et H. H. Sawin, *J. Vac. Sci. Technol. A* **19**(5) (2001) 2197.
- [18] J. W. Coburn et H. F. Winters, *J. Appl. Phys.* **50** (1979) 3189.
- [19] J. W. Coburn, *Plasma Chemistry, Basic Processes and PEVCD*, Plasma Processing of Semiconductors, NATO ASI Series **336** (1996) 64.
- [20] A. Gottscho et C.W. Jurgensen, *J. Vac. Sci. Technol.* **B10**(5) (1992) 2133.
- [21] M. Tuda, K. Ono, et K. Nishikawa, *J. Vac. Sci. Technol. B* **14**(5) (1996) 3291.
- [22] M. Tuda, K. Nishikawa, et K. Ono, *J. Appl. Phys.* **81**(2) (1997) 960.
- [23] S. Abdollahi-Alibeik, J. P. McVittie, K. C. Saraawat, V. Sukharev, et P. Schoenborn, *J. Vac. Sci. Technol. A* **17**(5) (1999) 2485.
- [24] R. N. Tai, S. K. Dew, T. smy, at M. J. Brett, *J. Vac. Sci. Technol. A* **10**(4) (1992) 912.
- [25] R. N. Tai, S. K. Dew, T. smy, at M. J. Brett, *J. Vac. Sci. Technol. A* **12**(4) (1994) 1085.
- [26] E. S. G. Shaqfeh et C. W. Jurgensen, *J. Appl. Phys.* **66**(10) (1989) 4664.
- [27] S. Hamaguchi, M. Dalvie, R. T. Farouki, et S. Sethuraman, *J. Appl. Phys.* **74**(8) (1993) 5172.
- [28] V. K. Singh, E. S. Shaqfeh, et J. P. McVittie, *J. Vac. Sci. Technol. B* **10**(3) (1992) 1091.



- [29] D. J. Cooperberg, V. Vahedi, et R. A. Gottscho, *J. Vac. Sci. Technol. A* **20**(5) (2002) 1536.
- [30] J. A Sethian, *J. Comput. Phys.* **169**, (2001), 503-555.
- [31] I. Karafyllidis et A. Thanailakis, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **3**, (1995), 629-642.
- [32] R. J. Hoekstra, M. J. Grapperhaus, et M. J. Kushner, *J. Vac. Sci. Technol. A* **15**(4) (1997) 1913.
- [33] R. J. Hoekstra, M. J. Kushner, V. Sukharev, et P. Schoenborn, *J. Vac. Sci. Technol. B* **16**(4) (1998) 2102.
- [34] J. P. Chang, A. P. Mahorowala, et H. H. Sawin, *J. Vac. Sci. Technol. A* **16**(1) (1998) 217.
- [35] A. P. Mahorowala, et H. H. Sawin, *J. Vac. Sci. Technol. B* **20**(3) (2002) 1064.
- [36] G. Marcos, A. Rhallabi, et P. Ranson, *J. Vac. Sci. Technol. A* **21**(1) (2003) 87.
- [37] M. A. Blauw, E. van der Drift, G. Marcos, et A. Rhallabi, *J. Appl. Phys.* **94**(10) (2003) 6311.
- [38] *GD Graphics Library* <http://www.boutell.com/gd/>
- [39] *libpng* <http://www.libpng.org/pub/png/libpng.html>
- [40] *Numerical Recipes in C online* <http://www.nrbook.com/a/bookcpdf.php>
- [41] L. Stafford, J. Margot, S. Delprat, M. Chaker, et S. J. Pearton, *J. Appl. Phys.* **101** 083303 (2007).
- [42] L. Stafford, J. Margot, M. Chaker, et S. J. Pearton, *Appl. Phys. Lett.* **87** (2005) 071502.

- [43] D. J. Economou, et R. C. Alkire, *J. Electrochem. Soc.* **135** (1988) 941.
- [44] J. P. Chang, et H. H. Sawin, *J. Vac. Sci. Technol. B* **19**(4) (2001) 1319
- [45] G. Wehner, *J. Appl. Phys.* **30**(11) (1959), 1752.
- [46] Y. Yin et H. H. Sawin, *J. Vac. Sci. Technol. A* **26**(1) (2008) 161.
- [47] J. R. Woodworth, M. E. Riley, P. A. Miller, G. A. Hebner, et T. W. Hamilton, *J. Appl. Phys.* **81**(9) (1997), 5950.
- [48] J. R. Woodworth, M. E. Riley, D. C. Meister, B. P. Aragon, M. S. Le, et H. H. Sawin, *J. Appl. Phys.* **80**(3) (1996), 1304.
- [49] J. R. Woodworth, M. E. Riley, P. A. Miller, C. A. Nichols, et T. W. Hamilton, *J. Vac. Sci. Technol. A* **15**(6) (1997) 3015.
- [50] E. S. Aydil, B. O. M. Quiniou, J. T. C. Lee, J. A. Gregus, et R. A. Gottscho, *Mat. Sci. Sem. Proc.* **1** (1998) 75-82.
- [51] S. Delprat, M. Chaker, et J. Margot, *Jpn. J. Appl. Phys. Lett.* **64** (1994) 1558.
- [52] G. A. Kimmel, D. M. Goodstein, Z. H. Levine, et B. H. Cooper, *Phys. Rev. B* **43**(12) (1991) 9403.
- [53] D. V. McCaughan, R. A. Kushner, et V. T. Murphy, *Phys. Rev. Lett.* **30**(13) (1973) 614.
- [54] J. M. Lane, F. P. Klemens, K. H. Bogart, M. V. Malyshev, et J. T. C. Lee, *J. Vac. Sci. Technol. A* **18**(1) (2000) 188.
- [55] A. P. Mahorowala, H. H. Sawin, R. Jones, et A. H. Labun, *J. Vac. Sci. Technol. B* **20**(3) (2002) 1055.
- [56] D. Zhang, S. Rauf, et T. Sparks, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **30**(1) (2002) 114.

- [57] D. B. Graves, et M. J. Kushner, *J. Vac. Sci. Technol. A* **21**(5) (2003) S152.
- [58] S. Ohki, M. Oda, H. Akiya, et T. Shibata, *J. Vac. Sci. Technol. B* **5**(6) (1987) 1611.
- [59] S. Salimian, et M. Delfino, *J. Appl. Phys.* **70**(7) (1991) 3970-3972.
- [60] Y. Z. Hu, P. P. Buaud, Y. Wang, L. Spanos, et E. A. Irene, *Appl. Phys. Lett.* **64**(10) (1994) 1233-1235.
- [61] M. Gaidi, L. Stafford, J. Margot, M. Chaker, R. Morandotti, et M. Kulishov, *Appl. Phys. Lett.* **86** 221106 (2005).
- [62] L. Stafford, M. Gaidi, M. Chaker, O. Langlois, J. Margot, F. Schiettekatte, et P. Wei *Appl. Phys. Lett.* **84**14 (2004).
- [63] D. Humbird, et D. B. Graves, *J. Appl. Phys.* **96**(1) (2004) 791.
- [64] H. F. Winters, et J. W. Coburn, *Surf. Sci. Rep.* **14** 161 (1992).
- [65] P. Gupta, P. A. Coon, B. G. Koehler, et S. M. George, *J. Chem. Phys.* **93**(4) 2867 (1990).
- [66] M. A. Vyvoda, H. Lee, M. V. Malyshev, F. P. Klemens, M. Cerullo, V. M. Donnelly, D. B. Graves, A. Kornblit, et J. T. C. Lee, *J. Vac. Sci. Technol. A* **16**(6) (1998) 3247.
- [67] M. V. Malyshev, et V. M. Donnelly, *J. Appl. Phys.* **90**(3) (2001) 1130.
- [68] M. V. Malyshev, et V. M. Donnelly, *J. Appl. Phys.* **88**(11) (2000) 6207.
- [69] K. R. Milkove, et C. X. Wang, *J. Vac. Sci. Technol. A* **15**(3) (1997) 596.
- [70] T. Shibano, K. Nakamura, T. Takenaga, et K. Ono, *J. Vac. Sci. Technol. A* **17**(3) (1999) 799.
- [71] S. Delprat, *Étude de la gravure ionique de matériaux dans un magnétoplasma d'argon*, mémoire de maîtrise, INRS-Énergie et Matériaux (1999) 57.

- [72] F. Liu, O. R. Monteiro, K. M. Yu, et I. G. Brown, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Research B* **132** (1997) 188-192.
- [73] G. G. Ross, et C. Sévigny, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Research B* **211** (2003) 351-357.
- [74] S. Murakawa, S. Fang, et J. P. McVittie, *Phys. Rev. Lett.* **64**(12) (1994) 1558.
- [75] J. J. Végh, D. Nest, D. B. Graves, R. Bruce, S. Engelmann, T. Kwon, R. J. Phaneuf, G. S. Oehrlein, B. K. Long, et C. G. Willson, *Appl. Phys. Lett.* **91** 233113 (2007).
- [76] S. Delprat, M. Chaker, et J. Margot, *J. Appl. Phys.* **89**(1) (2001) 29.
- [77] W. O. Hofer, *Topics Appl. Phys.* **64** (1991) 15.
- [78] G. K. Wehner, et D. Rosenberg, *J. Appl. Phys.* **31**(1) (1960) 177.
- [79] M. stepanova, et S. K. Dew, *J. Vac. Sci. Technol. A* **19**(6) (2001) 2805.
- [80] R. Kawakami, J. Kawata, et K. Ohya, *Jpn. J. Appl. Phys.* **38** (1999) 6058-6065.
- [81] M. Stepanova, et S. K. Dew, *J. Appl. Phys.* **92**(3) (2002) 1699.
- [82] E. Franke, H. Neuman, M. Zeuner, W. Frank, et F. Bigl, *Surf. Coat. Technol.* **97** (1997) 90-96.
- [83] J. P. Biersack, et L. G. Haggmark, *Nucl. Instr. Methods* **174** (1980) 257.
- [84] A. Thran, M. Kiene, V. Zaporojtchenko, et F. Faupel, *Phys. Rev. Lett.* **82**(9) (1999) 1903.

## Annexe I

### Méthode de Box-Muller

La méthode de Box-Muller permet de générer des nombres aléatoires selon une distribution normale (Gaussienne). Une distribution de probabilité Gaussienne peut être écrite sous la forme suivante :

$$p(y)dy = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-y^2/2} dy \quad (\text{I.1})$$

où  $y$  est un nombre aléatoire selon une déviation uniforme compris entre 0 et 1, c'est-à-dire avec équiprobabilité sur l'intervalle.

Si on considère la transformation entre deux déviations uniformes sur  $[0, 1]$ ,  $x_1$ ,  $x_2$ , et deux quantités  $y_1$ ,  $y_2$ ,

$$y_1 = \sqrt{-2\ln x_1} \cos 2\pi x_2 \quad (\text{I.2})$$

$$y_2 = \sqrt{-2\ln x_1} \sin 2\pi x_2 \quad (\text{I.3})$$

on peut dire que  $y_1$  et  $y_2$  sont des variables aléatoires indépendantes avec une distribution normale de déviation 1. En d'autres termes, pour avoir deux quantités ( $y_1$  et  $y_2$ ) distribuées selon une loi uniforme, il suffit de tirer au hasard deux autres quantités ( $x_1$  et  $x_2$ ) selon une déviation uniforme et d'appliquer la loi de transformation ci-dessus.