

Université de Montréal

**Simulation de profils de gravure et de dépôt à l'échelle
du motif pour l'étude des procédés de microfabrication
utilisant une source plasma de haute densité à basse
pression**

par

Michael Laberge

Département de physique

Faculté des arts et des sciences

Mémoire présenté à la Faculté des études supérieures
en vue de l'obtention du grade de Maître ès sciences (M.Sc.)
en Physique

Août, 2012

© Michael Laberge, 2012

Université de Montréal
Faculté des études supérieures et postdoctorales

Ce mémoire intitulé :

Simulation de profils de gravure et de dépôt à l'échelle du motif pour l'étude des procédés
de microfabrication utilisant une source plasma de haute densité à basse pression

Présenté par :
Michael Laberge

a été évalué par un jury composé des personnes suivantes :

Michel Moisan, président-rapporteur
Joëlle Margot, directrice de recherche
François Schiettekatte, membre du jury

RÉSUMÉ

En lien avec l'avancée rapide de la réduction de la taille des motifs en microfabrication, des processus physiques négligeables à plus grande échelle deviennent dominants lorsque cette taille s'approche de l'échelle nanométrique. L'identification et une meilleure compréhension de ces différents processus sont essentielles pour améliorer le contrôle des procédés et poursuivre la «nanométrisation» des composantes électroniques. Un simulateur cellulaire à l'échelle du motif en deux dimensions s'appuyant sur les méthodes Monte-Carlo a été développé pour étudier l'évolution du profil lors de procédés de microfabrication. Le domaine de gravure est discrétisé en cellules carrées représentant la géométrie initiale du système masque-substrat. On insère les particules neutres et ioniques à l'interface du domaine de simulation en prenant compte des fonctions de distribution en énergie et en angle respectives de chacune des espèces. Le transport des particules est effectué jusqu'à la surface en tenant compte des probabilités de réflexion des ions énergétiques sur les parois ou de la réémission des particules neutres. Le modèle d'interaction particule-surface tient compte des différents mécanismes de gravure sèche telle que la pulvérisation, la gravure chimique réactive et la gravure réactive ionique. Le transport des produits de gravure est pris en compte ainsi que le dépôt menant à la croissance d'une couche mince. La validité du simulateur est vérifiée par comparaison entre les profils simulés et les observations expérimentales issues de la gravure par pulvérisation du platine par une source de plasma d'argon.

Mots-clés : Plasma, Gravure, Dépôt en phase vapeur, couche mince, Simulation de profil, Microfabrication

ABSTRACT

With the reduction of feature dimensions, otherwise negligible processes are becoming dominant in microfabricated profile evolution. Improved understanding of these different processes is essential to improve the control of the microfabrication processes and to further decrease of the feature size. To help attaining such control, a 2D feature scale cellular simulator using Monte-Carlo techniques was developed. The calculation domain is discretized in square cells representing empty space, substrate or mask of the initial system. Neutral and ion species are inserted at simulation interface from their respective angular and energy distributions functions. Particles transport to the feature surface is calculated while taking into account ion reflection on sidewall and neutral reemission. The particles-surface interaction model includes the different etching mechanisms such as sputtering, reactive etching and reactive ion etching. Etch product transport is also taken into account as is their deposition leading to thin film growth. Simulation validity is confirmed by comparison between simulated profiles and experimental observations issued from sputtering of platinum in argon plasma source.

Keywords : Plasma, Etching, Deposition, Thin film, Feature scale simulation, Microfabrication

TABLE DES MATIÈRES

Résumé	i
Abstract	ii
Liste des figures	vi
Remerciements	xii
Chapitre 1. INTRODUCTION	1
1.1 La microfabrication	4
1.1.1 Gravure de tranchée.....	6
1.1.2 Dépôt par « lift-off ».....	7
1.1.3 Rapport d'aspect.....	8
1.2 Plasma à pression réduite.....	9
1.2.1 Sources de plasma à haute densité	10
1.2.2 Plasma à couplage inductif (ICP)	12
1.2.3 Autres types de plasmas utilisés en microfabrication.....	15
1.3 Gravure	16
1.3.1 Pulvérisation par bombardement ionique de basse énergie.....	18
1.3.2 Gravure réactive.....	21
1.3.3 Gravure réactive assistée par bombardement ionique	22
1.4 Dépôt.....	23
1.5 Gravure ionique réactive profonde	26
1.5.1 Procédé Bosch	26
1.5.2 Gravure cryogénique	28
1.6 Imagerie des profils par microscopie électronique à balayage	29
1.7 Défauts des profils	31

Chapitre 2. Méthode de simulation particulaire de type «particle-in-cell»/Monte-Carlo	34
2.1 Généralités sur les simulations particulières de type « Particle-in-Cell »	34
2.1.1 Équations du mouvement.....	36
2.1.1.1 Taille des cellules.....	37
2.1.1.2 Pas de temps	38
2.1.2 Équations du champ électrique.....	39
2.1.2.1 Modèle des particules de taille finie.....	40
2.1.2.2 Résolution de l'équation de Poisson	41
2.2 Méthode Monte Carlo.....	44
2.2.1 Génération de nombre aléatoire.....	44
2.2.2 Échantillonnage des fonctions de distributions	45
2.2.2.1 Méthode de la transformée inverse.....	46
2.2.2.2 Méthode de rejet de Von Neumann	48
2.2.3 Méthode de Monte-Carlo cinétique.....	49
Chapitre 3. Présentation du simulateur de profil cellulaire.....	53
3.1 Transport des particules.....	53
3.1.1 Particules neutres	54
3.1.2 Particules ioniques	58
3.1.2.1 Gaine ionique.....	58
3.1.2.2 Fonction de distribution angulaire des ions (FDAI).....	60
3.1.2.3 Fonction de distribution en énergie des ions (FDEI).....	64
3.2 Modélisation de la surface	66
3.2.1 Géométrie du profil	66
3.2.1.1 Modèle sous cellulaire du calcul des collisions.....	67
3.2.2 Pulvérisation par bombardement ionique de basse énergie	68
3.2.2.1 Fonction de distribution des espèces pulvérisées.....	70
3.2.2.2 Pulvérisation de matériaux composés.....	74
3.2.2.3 Influence de l'orientation cristalline de l'échantillon	75

3.2.3 Gravure réactive	76
3.2.4 Gravure réactive assistée par bombardement ionique	77
3.2.5 Réflexion sur les parois	78
3.2.6 Dépôt des espèces non réactives	79
3.2.6.1 Dépôt physique des particules thermiques.....	80
3.2.6.2 Dépôt physique des particules cinétiques	80
3.2.6.3 Rétrodiffusion des espèces pulvérisées.....	82
3.2.7 Diffusion de surface	83
3.3 Référence de la littérature scientifique	84
3.4 Contributions personnelle et originalité du projet	85
Chapitre 4. Simulation de pulvérisation et de dépôt de couche mince de platine	88
4.1 Gravure de tranchées	90
4.2 Gravure de profils en T inversé	94
4.2.1 Cas à basse pression	96
4.2.2 Cas à haute pression.....	99
4.3 Dépôt physique du platine en phase vapeur	104
Chapitre 5. Conclusion et perspectives	107
Bibliographie	111

LISTE DES FIGURES

Figure 1. Évolution du nombre de transistors sur les microprocesseurs Intel depuis leur introduction en 1971.	2
Figure 2. Dates d'introduction des différents matériaux utilisés en microfabrication. La réduction de la taille des motifs a obligé l'industrie à chercher de nouveaux matériaux dotés de propriétés électroniques avantageuses.	3
Figure 3. Vue en coupe transversale d'un microprocesseur Samsung A5X utilisé dans le iPad (2012) de Apple [12].	4
Figure 4. Étapes d'un procédé typique de microfabrication. (a) Dépôt de la couche à graver sur le substrat. (b) Dépôt de la résine photo sensible servant de masque. (c) Lithographie de la résine à partir d'un masque à motifs. (d) Développement de la résine. (e) Gravure du matériau. (f) Nettoyage des résidus de résine.	6
Figure 5. Étapes du procédé de dépôt par lift-off. a) Lithographie avec masque de la résine photosensible. b) Développement de la résine. c) Dépôt du matériau. d) Retrait des résidus de résine.	7
Figure 6. Structure en peigne à haut rapport d'aspect à la surface d'un micro-acceleromètre.	9
Figure 7. Configuration des principales sources de plasma à haute densité [27]. a) Réacteur à résonance cyclotronique électronique, b) Réacteur Hélicon, c) Réacteur à couplage inductif.	11
Figure 8. Schéma du réacteur	14
Figure 9. Schéma des différents mécanismes de gravures. a) Gravure par pulvérisation par bombardement ionique, b) Gravure réactive spontanée, c) Gravure réactive assistée par bombardement ionique.	17
Figure 10. Impact du degré d'anisotropie A sur la topographie du profil. R_h et R_v représentent l'épaisseur gravée respectivement dans la direction horizontale et verticale.	18

a) Régime de collision simple, b) Régime de cascade linéaire de collisions	19
Figure 12. Mesure de vitesses de gravures démontrant le phénomène de gravure assisté par bombardement ionique [75].	22
Figure 13. Différents gaz utilisés dans les systèmes de gravure réactive assistés par bombardement ionique [80].	23
Figure 14. a) Dépôt chimique ou physique par phase vapeur. b) Dépôt chimique ou physique en phase vapeur assisté par plasma. c) Dépôt par pulvérisation plasma.....	24
Figure 15. Paramétrisation du profil de remplissage d'une tranchée simple de rapport d'aspect V/H. D_b et D_h sont les mesures d'épaisseur du dépôt respectivement dans le bas de la tranchée et sur le haut du masque du motif à déposer. C_{min} et C_{max} sont les tailles caractéristiques de la mesure d'épaisseur du dépôt sur les parois de la tranchée.	25
Figure 16. Paramétrisation du profil de remplissage d'une série de tranchées. H_{max} et H_{min} sont les tailles respectives du maximum et minimum d'épaisseur du dépôt.....	26
Figure 17. Schéma des étapes du procédé de gravure ionique réactive profonde [96].	27
Figure 18. Démonstration de l'effet combiné du bombardement ionique et de la passivation des parois dans la méthode de gravure cryogénique du Si [97]	28
Figure 19. Schéma d'un microscope à balayage électronique	30
Figure 20. Comparaison entre les deux modes de fonctionnement du microscope à balayage électronique [98].	31
Figure 21. Principaux défauts de gravures associés à la gravure à fort rapport d'aspect [99].	32
Figure 22. Principaux défauts de profils des procédés de dépôts. a) Microtranchée formée lors du dépôt par faisceau d'ions [106] b) Formation de cavité lors du dépôt physique en phase vapeur [107] c) Effet du rapport d'aspect de la tranchée sur la planéité de la couche [108] d) Formation de fissures et dislocations lors de la croissance [109]....	33
Figure 23. Nombre de publications par année contenant le mot clé «particle-in-cell» selon une recherche effectuée sur la base de données Engineering Village (15/7/2012).	35

Figure 24. Schématisation de l'algorithme du « saut de grenouille ». Le nom provient du fait que la particule « saute » d'un état à un autre en utilisant la vitesse calculée à chaque demi-pas de temps.....	37
Figure 25. a) Facteur de forme carrée qui représente un cercle uniformément chargé. b) Facteur de forme gaussien qui représente un cercle dont la composante radiale de la charge suit une loi normale.	40
Figure 26. Schéma de l'algorithme d'interpolation de la densité de charge. La charges aux nœuds (1,2,3,4) est calculée en intégrant la densité de charge présente dans chaque cellules.....	41
Figure 27. Diagramme du cycle élémentaire de calcul de la méthode particle-in-cell dans le cas d'un champ électromagnétique.	43
Figure 28. Schéma de l'algorithme de rejet de Von Neumann	48
Figure 29. Schéma du calcul du flux direct de neutres provenant de la phase vapeur.....	56
Figure 30. Schéma du calcul du flux secondaire Γ_r de particules neutres provenant de la réémission des parois.	57
Figure 31. Densité ionique des différentes espèces dans un plasma de Ar/Cl ₂ [144].	60
Figure 32. Vue schématisée en trois dimensions d'une tranchée gravée par un bombardement ionique.....	61
Figure 33. Distribution angulaire du flux à la surface en fonction du paramètre R [142].	63
Figure 34. a) Distribution en énergie du Xe à la surface d'un substrat polarisé à diverses fréquences [150]. b) Distribution en énergie d'un plasma à diverses espèces [151].	65
Figure 35. a) Profil expérimental obtenu par microscopie électronique à balayage. b) Profil numérisé.	67
Figure 36. Comparaison de la cellule où s'effectue le dépôt entre le modèle traditionnel des collisions cellulaires (b) et le modèle sous cellulaire (c).	68
Figure 37. Dépendance énergétique du rendement de pulvérisation du Pt donnée par l'équation (63) ajustée sur les données présentées par Eckstein [64].	69

Figure 38. a) Dépendance angulaire expérimental du rendement de pulvérisation du Si polycristallin sous l'effet du bombardement par Ar^+ [157]. Ajustement du rendement de pulvérisation relatif à partir de statistiques produites par SRIM.....	70
Figure 39. Fonction de distribution en énergie des particules pulvérisées d'une cible de Al sous bombardement de Ar [69]. a) Énergie d'incidence $E = 500\text{eV}$, b) $E = 200\text{eV}$..	71
Figure 40. Fonction de distribution angulaire des particules pulvérisées à angle d'incidence normale pour des valeurs du ratio E_{th}/E de a) 0.35, b) 0.29 et c) 0.46 [68].	73
Figure 41. Fonction de distribution angulaire des particules pulvérisées d'une cible de Pt sous bombardement par Ar et Xe. a) Angle d'incidence normal $\theta=0^\circ$, b) angle d'incidence oblique $\theta=45^\circ$	74
Figure 42. a) Dépendance angulaire de la pulvérisation de métaux cristallins par bombardement ionique [158]. b) Dépendance angulaire de la pulvérisation du Pt par Ar^+ selon deux plans cristallins [159].	75
Figure 43. a) Dépendance angulaire du rendement de gravure du Si par Cl et Cl^+ à 35eV pour un ratio de flux neutre/ion de 200 [160]. b) Évolution du degré de recouvrement θ avec l'augmentation du flux ionique Γ_{ion} . L'augmentation du flux Γ_{ion} occasionne la diminution du degré de recouvrement θ	78
Figure 44. a) Distribution angulaire des ions réfléchis après une collision à un angle d'incidence de 80° [163], b) Modèle de probabilité de réflexion défini par l'angle d'incidence critique θ_c	79
Figure 45. Adsorption d'un atome énergétique a) Diffusion dirigée de l'atome déposé. b) Déplacement d'un atome de surface lors du dépôt.	81
Figure 46. Vue schématisée du calcul du nombre de voisins lors du dépôt d'adatoms. ...	81
Figure 47. Dépendance de la pression sur le degré de redéposition lors de la pulvérisation de SBT, BST, Pt dans une décharge d'argon [42].	82
Figure 48. Schématisation des différentes probabilités de diffusion dans l'algorithme de diffusion cellulaire.	84

Figure 49. Influence du mélange de gaz sur le profil de gravure et l'épaisseur de platine redéposé sur les parois [190].	89
Figure 50. Distribution en énergie des particules pulvérisées d'une surface de Pt sous l'effet du bombardement d'ions Ar et Xe.	90
Figure 51. a) Simulation du profil de gravure d'une tranchée de 2 μm de platine par pulvérisation dans un plasma d'argon à une pression de 0.5 mTorr et avec une tension de polarisation de 50 V b) Données expérimentales dans les mêmes conditions [98]91	91
Figure 52. Simulation du profil de gravure d'une tranchée de 2 μm de platine par pulvérisation dans un plasma d'argon à une pression de 0.5 mTorr et avec une tension de polarisation de 50 V. La deuxième image correspond au temps de gravure requis pour atteindre le profil présenté dans la figure 51.	92
Figure 53. (a) Simulation du profil de gravure d'une tranchée de 0.5 μm par pulvérisation dans un plasma d'argon à une pression de 0.5 mTorr et avec une tension de polarisation de 100 V (b) Données expérimentales sous les mêmes conditions [191].	93
Figure 54. Superposition du profil simulé, par ajustement de la perspective, et du profil expérimental présenté dans la figure 53.	94
Figure 55. Trois différentes géométries de motifs en T inversé avant la gravure. La largeur de la tranchée varie entre environ 2 μm et 6 μm (non présenté sur la figure).	95
Figure 56. (a) Exemple de profil initial obtenu par microscopie comparée au (b) profil converti pour le simulateur.	95
Figure 57. Comparaison entre la simulation et les données du profil de gravure d'un motif en T inversé par pulvérisation dans un plasma d'argon à une pression de 1 mTorr et avec une tension de 125 V.	96
Figure 58. Comparaison entre la simulation et les données expérimentales du profil de gravure d'un motif en T inversé à cavité large par pulvérisation dans un plasma d'argon à une pression de 1 mTorr et avec une tension de 125 V.	98
Figure 59. Superposition du profil simulé et du profil expérimental présentés dans la figure 58.	98

Figure 60. Comparaison entre la simulation et les données du profil de gravure d'un motif en T inversé à cavité large par pulvérisation dans un plasma de xénon à une pression de 1 mTorr et avec une tension de polarisation de 100 V.	99
Figure 61. Dépendance de la pression sur le profil de densité de cuivre neutre et ionisé produit par pulvérisation dans une décharge d'argon [165].	100
Figure 62. Comparaison entre la simulation et les données du profil de gravure d'un motif en T inversé par pulvérisation dans un plasma d'argon et de xénon à une pression de 30 mTorr et avec une tension de polarisation de 100 V et 125 V respectivement. ...	101
Figure 63. Schéma de l'effet d'ombrage des particules neutres par la paroi supérieure de la cavité.	102
Figure 64. Comparaison entre la simulation et les données du profil de gravure d'un motif en T inversé à cavité large par pulvérisation dans un plasma d'argon à une pression de 30 mTorr et sous une tension de polarisation de 125 V.	103
Figure 65. Comparaison entre la simulation et les données du profil de gravure d'un motif en T inversé à cavité large par pulvérisation dans un plasma de xénon à une pression de 10 mTorr et avec une tension de 125 V.	103
Figure 66. a) Simulation du remplissage de tranchées par vapeur de platine pour différents rapports d'aspects, b) Profils expérimentaux de remplissage de tranchée par vapeur métallique de cuivre [107].	104
Figure 67. Comparaison entre a) la simulation du profil de dépôt de vapeur de platine assisté par bombardement ionique et b) résultats de simulation du dépôt de cuivre assisté par bombardement ionique [193].	106
Figure 68. a) Simulation démontrant la microstructure colonnaire obtenue lors du dépôt de platine par faisceau d'ions de faible énergie à angle d'incidence de 75°. b) Dépôt effectué à un angle d'incidence de 85° résultant en une microstructure colonnaire inclinée [194].	106

REMERCIEMENTS

Je désire premièrement remercier ma directrice de maîtrise, Joëlle Margot, de m'avoir accordé la confiance et la liberté nécessaire dans la poursuite de mes travaux. Je remercie également l'équipe de l'INRS (Mohamed Chaker, Sébastien Delprat, Sébastien Vigne) pour les discussions pertinentes et leurs conseils judicieux, particulièrement Sébastien Delprat pour son travail en laboratoire.

Je remercie l'ensemble des membres du groupe avec lesquels il y a toujours eu une ambiance amicale et agréable. Leur support et leur positivisme furent très appréciés et cruciaux à la réalisation de mon mémoire.

Je remercie finalement tous les gens qui ont dû m'endurer dans la vie de tous les jours tout en me bottant les fesses, en particulier ma copine et Zack, ainsi que ma famille et mes amis.

CHAPITRE 1.

INTRODUCTION

L'industrie des semi-conducteurs est en constante expansion depuis environ une quarantaine d'années. Cette croissance fulgurante, au début poussée par la quête spatiale américaine, fut rapidement conduite par les demandes toujours grandissantes du marché des appareils électroniques, en particulier depuis l'insertion des circuits intégrés dans les appareils domestiques tels que les récepteurs radio et les télévisions au début des années 1970. Depuis, en plus de répondre à cette forte demande, le marché fait également pression sur les fabricants en exigeant constamment de nouveaux produits dépassant les attentes établies par la génération précédente. Année après année, ceux-ci doivent être davantage miniaturisés tout en étant plus performants et dotés de plus de capacité. Pour atteindre ces buts, l'industrie a dû, et doit encore, parfaire les procédés de microfabrication et développer de nouvelles techniques pour permettre la miniaturisation des composantes.

Depuis l'invention du circuit intégré, on observe que la densité de transistors double à tout les 12 à 18 mois (fig. 1). Cette tendance, connue sous la Loi de Moore, fut prédite par le chercheur du même nom en 1965 [1]. Bien qu'à l'époque cet énoncé semblât banal, la redoutable précision avec laquelle cette loi a décrit l'évolution de la microélectronique depuis plus de 40 ans en fait maintenant un outil prédictif pour les avancées futures. Les attentes du marché font en sorte que l'industrie se permet même d'établir ses calendriers de lancement jusqu'à une décennie d'avance en supposant pouvoir soutenir cette cadence. Par contre, cette loi ne pourra pas toujours être soutenue par la simple miniaturisation des procédés. Puisque les atomes sont de taille finie, en s'approchant de la limite atomique, des phénomènes physiques anodins à plus grande échelle viennent compromettre les propriétés électroniques et la durabilité des dispositifs. En effet, le développement des procédés 14 nm, attendu pour 2014, fait face à plusieurs défis [2] de taille. On note à titre d'exemple, l'approche de la limite de résolution de la lithographie UV, la dégradation

étapes de recherche, développement et design d'une nouvelle composante électronique [6]. L'augmentation des coûts a eu comme effet de créer un monopole des nouvelles technologies, en écartant les plus petits joueurs n'ayant pas les moyens financiers de participer à la course à la miniaturisation.

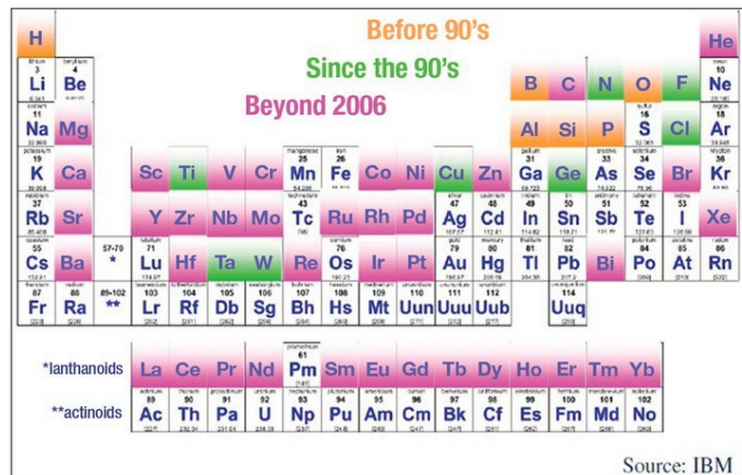


Figure 2. Dates d'introduction des différents matériaux utilisés en microfabrication. La réduction de la taille des motifs a obligé l'industrie à chercher de nouveaux matériaux dotés de propriétés électroniques avantageuses.

En conséquence, une partie du marché s'est tournée vers le développement de nouveaux produits se basant sur l'intégration de système complexe sur puce à partir des technologies actuelles. On cite, entre autres, l'industrie des systèmes microélectromécaniques (MEMS) [7], des composantes monopuce (SoC) [8] et de la micro/nano fluide [9]. C'est dans cette optique que nous présentons dans cet ouvrage l'élaboration d'un simulateur de profils de gravure et de dépôt issus de procédés de microfabrication utilisant des sources plasma de haute densité à basse pression. Nous commencerons par rappeler les concepts généraux des procédés de gravures et de dépôt. Nous introduirons ensuite les concepts théoriques de la simulation particulière/Monte-Carlo de plasma ainsi que le modèle cellulaire utilisé pour simuler l'évolution de la surface. Finalement, nous présenterons les résultats obtenus en comparant les simulations aux profils expérimentaux en s'intéressant particulièrement au cas de la gravure de platine par un plasma d'argon.

1.1 La microfabrication

La microfabrication consiste en l'ensemble des techniques visant la reproduction de motifs à l'échelle micro ou sous-micrométrique par gravure ou dépôt de matière. On attribue l'invention de ces techniques à Jack Kilby, alors qu'il fut, en 1959 [10], le premier à réaliser un circuit intégré fonctionnel. On définit le circuit intégré, mieux connu sous le nom de puce électronique, comme un ensemble de micro-composantes électroniques interconnectées. Cette invention fut la bougie d'allumage du passage de l'être humain à l'ère de l'électronique, comme en témoigne l'attribution du prix Nobel de physique à Kilby en 2000 [11].

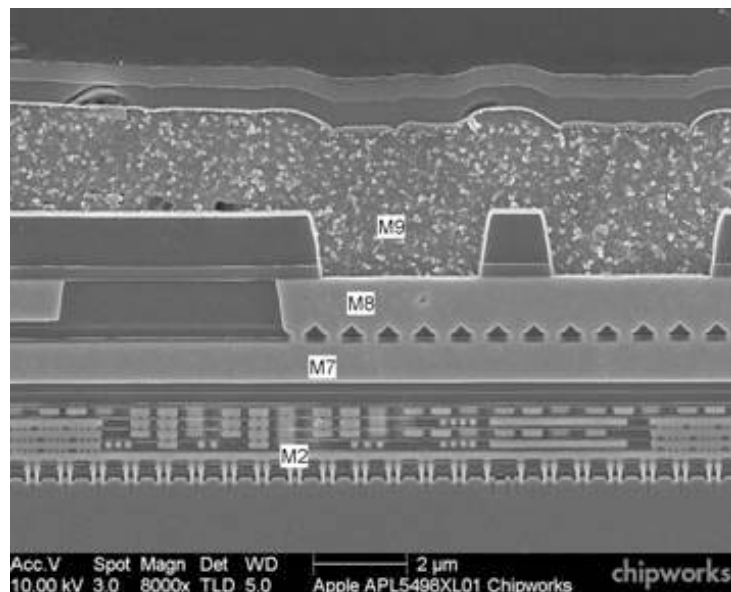


Figure 3. Vue en coupe transversale d'un microprocesseur Samsung A5X utilisé dans le iPad (2012) de Apple [12].

Jusqu'à la fin des années 1970, on gravait le silicium à l'aide de solutions acides ce qui limitait la largeur minimale des motifs à l'ordre du micromètre. Depuis les trois dernières

décennies, le développement de techniques de gravure sèche a permis à la miniaturisation des composantes de se poursuivre en dessous de l'échelle micrométrique. La gravure sèche est effectuée en exposant la surface à un flux de particules produit par un gaz ionisé. La gravure en tant que telle est engendrée par des réactions chimiques entretenues par des radicaux réactifs ou par la pulvérisation par des particules à haute énergie. Le gaz ionisé est produit par un réacteur à plasma; en général on utilise une source de plasma à haute densité. L'introduction de ce type de plasma en microfabrication fut un facteur important dans la course à la miniaturisation et permit dès les années 80 [13] d'atteindre une précision de gravure sous-micrométrique du silicium. Depuis ce temps, grâce à l'évolution et au raffinement des techniques de microfabrication, l'échelle du nanomètre est accessible en utilisant le même type de source plasma à haute densité. Par exemple, les plus récents microprocesseurs Intel sont dotés de motifs dont la largeur minimale est de 22 nm [14].

Pour revenir à l'aspect microfabrication, le transfert de motif ne se limite pas seulement à la gravure de tranchée. Il s'agit d'un ensemble de procédés complexes alternant le dépôt et la gravure de différents matériaux. Chacune des étapes doit être effectuée avec une extraordinaire régularité, puisque le circuit intégré final est le résultat de plusieurs couches interconnectées. En observant une vue en coupe d'un microprocesseur (fig. 3) à l'aide d'un microscope électronique, on remarque bien ces structures en tranchées empilées les unes sur les autres jusqu'à la surface où sont exposées les broches de connexions de la puce électronique. Dans la prochaine section, on présente en détail les étapes de deux procédés de microfabrication essentiels dans la conception de circuits complexes, soit la gravure de tranchées et le dépôt par « lift-off ».

1.1.1 Gravure de tranchée

Le procédé de gravure (fig. 4) débute par la croissance d'une couche mince sur un substrat. Cette couche mince est le matériau dans lequel le motif sera transféré. On dépose ensuite une couche de résine qui servira de masque lors de la gravure. Le motif est transféré dans la résine à l'aide d'un masque qui expose les parties de la résine destinées à être retirées. En fonction de la technologie de lithographie utilisée, on expose la résine à un rayonnement UV ou à un faisceau d'électrons. Suite cette exposition, les liens chimiques du polymère de la résine se brisent ce qui permet de retirer ces fragments en utilisant simplement un solvant liquide ou l'exposition à un plasma d'oxygène. La prochaine étape consiste en la gravure sèche de la surface exposée par l'étape de lithographie. Selon le type de procédé de gravure, différents mécanismes physiques sont responsables de l'érosion de la surface. Ces mécanismes seront abordés en détail dans la section 1.3. Pour finaliser le procédé, la couche de résine résiduelle est retirée pour finalement exposer la tranchée.

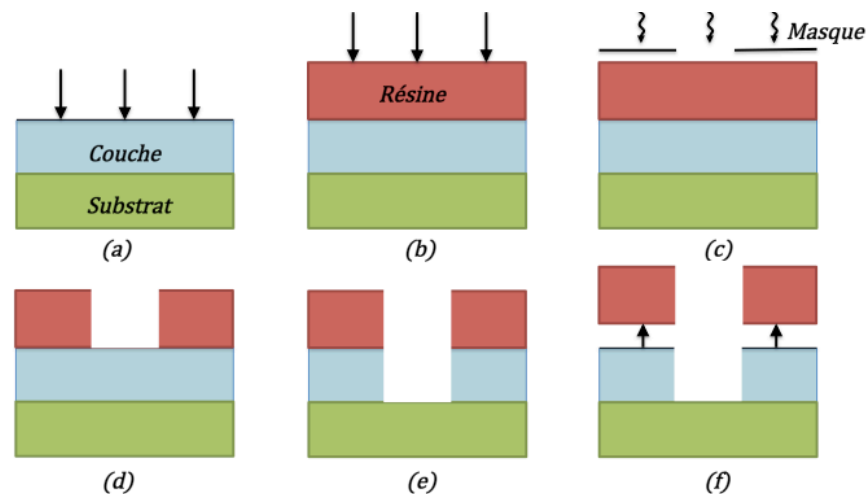


Figure 4. Étapes d'un procédé typique de microfabrication. (a) Dépôt de la couche à graver sur le substrat. (b) Dépôt de la résine photo sensible servant de masque. (c) Lithographie de la résine à partir d'un masque à motifs. (d) Développement de la résine. (e) Gravure du matériau. (f) Nettoyage des résidus de résine.

1.1.2 Dépôt par « lift-off »

Le procédé de « lift-off » est une technique de microfabrication couramment utilisée pour le transfert d'un motif par dépôt de couche mince. Cette méthode est généralement utilisée pour le remplissage de tranchées par vapeur métallique qui serviront de conducteur pour l'interconnexion des composants dans les circuits intégrés. Le procédé débute par le dépôt d'une couche sacrificielle de résine sur le substrat. Comme dans le procédé de gravure, on procède ensuite à l'étape de lithographie pour le transfert du motif vers la résine. On dépose alors le matériau avec lequel la tranchée sera remplie. Plusieurs technologies permettent le dépôt en phase vapeur. Notons en particulier, le dépôt chimique ou physique en phase vapeur (CVD, PVD) [15, 16], le dépôt en phase vapeur ionisée (I-PVD) [17] et le dépôt assisté par plasma (PECVD, PEPVD) [18, 19]. On finalise le travail en retirant le restant de résine pour se retrouver avec le motif désiré déposé sur le substrat.

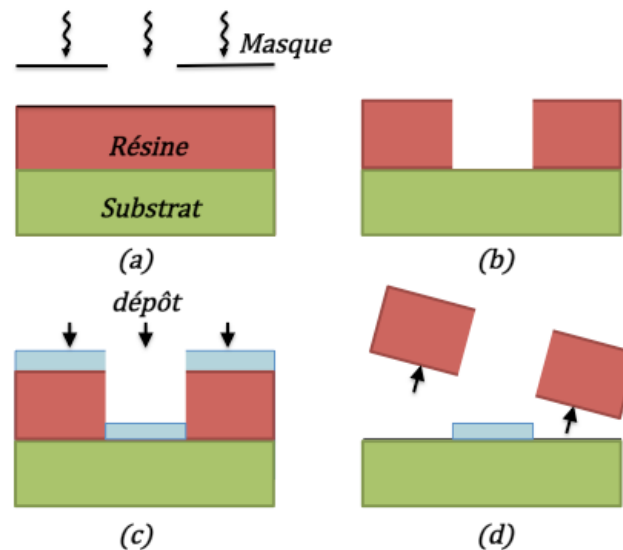


Figure 5. Étapes du procédé de dépôt par lift-off. a) Lithographie avec masque de la résine photosensible. b) Développement de la résine. c) Dépôt du matériau. d) Retrait des résidus de résine.

La technique de lift off (fig. 5) est également utilisée pour le dépôt de masque de gravure métallique aussi appelé masque dur [20]. Ces masques sont réalisés à l'aide de métaux chimiquement inertes (TiN, Ni, Au, Pt, W) dans le but d'obtenir une meilleure sélectivité lors de la gravure réactive comparativement aux polymères composant la résine standard.

1.1.3 Rapport d'aspect

Aussi bien dans les systèmes de gravure que pour ceux de dépôt de couche mince, la géométrie initiale influence grandement l'évolution du profil. Pour des parois initialement verticales, on caractérise la tranchée par le rapport d'aspect R que l'on définit comme suit :

$$R = \frac{V}{H} \quad (1)$$

où H et V sont les tailles horizontales et verticales de la tranchée. Le rapport d'aspect est un paramètre important puisqu'il est le facteur principal influençant le transport des espèces vers le fond de la tranchée et est responsable de l'effet d'ombrage des particules réactives. Il s'agit toujours du point central à la course à la miniaturisation, les nouveaux procédés de gravure devant permettre une gravure plus étroite tout en gardant un haut rapport d'aspect. De plus, les besoins de l'industrie des MEMS ont également poussé la recherche dans le but de développer des technologies permettant une gravure à très haut rapport d'aspect (>25) (fig. 6). Plusieurs techniques furent développées pour atteindre ces objectifs. On présentera dans la section 1.5 deux méthodes populaires de gravure à fort rapport d'aspect, soit le procédé Bosch et la gravure cryogénique.

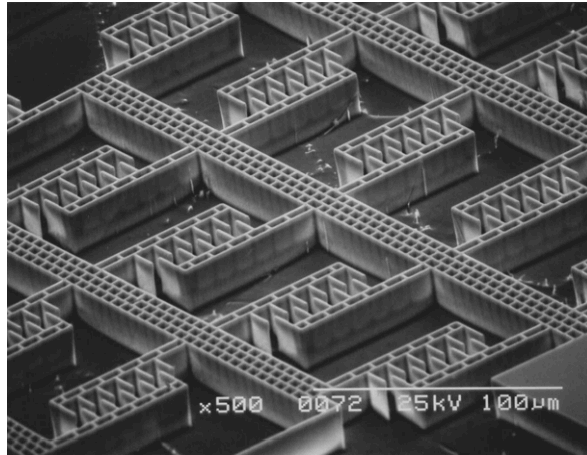


Figure 6. Structure en peigne à haut rapport d'aspect à la surface d'un micro-acceleromètre.

La fabrication d'une composante électronique requiert également plusieurs autres étapes de microfabrication, tels le dopage par implantation ionique et l'oxydation thermique des surfaces dans le but d'obtenir les propriétés électriques désirées. Puisque ces sujets sortent du contexte général de ce travail, une présentation plus détaillée est disponible dans plusieurs ouvrages de la littérature [21-23]. Avant de poursuivre sur l'aspect transfert de motif, prenons un instant pour présenter les sources de plasmas à haute densité utilisées comme source de particules réactives pour effectuer les étapes de gravure dans les procédés présentés ci-haut.

1.2 Plasma à pression réduite

Le traitement de surface par plasma à pression réduite est à l'heure actuelle la technologie de pointe utilisée dans les procédés de microfabrication. L'utilisation d'un gaz ionisé permet à la fois d'obtenir des radicaux réactifs et des ions, qui sont essentiels pour effectuer un procédé de gravure sèche. L'arrivée de cette nouvelle technologie dans le domaine de la microfabrication au milieu des années 1970 a permis la poursuite fulgurante

de la miniaturisation des composantes. Depuis, l'avancé et le perfectionnement des procédés de lithographies de concert avec un contrôle toujours meilleur des recettes de gravure par plasma ont permis de soutenir le rythme prédit par la loi de Moore [24]. La grande flexibilité des procédés par plasma leur confère un statut privilégié dans le traitement de la plupart des matériaux métalliques, diélectriques, les oxydes et les polymères [25]. Dans les sections suivantes, on présente brièvement les différents types de source de plasma à haute densité utilisés dans les procédés de microfabrication en portant une attention particulière au réacteur à couplage inductif qui fut utilisé dans nos laboratoires pour la gravure de divers matériaux.

1.2.1 Sources de plasma à haute densité

On utilise le terme « source de plasma » lorsque le plasma est généré sans électrode. Généralement cela se fait à l'aide d'un champ électromagnétique radiofréquence, comme c'est le cas dans les décharges à couplage inductif. Ce type de plasma comporte plusieurs avantages par rapport aux décharges capacitatives avec électrode. Premièrement, les sources à haute densité génèrent un plasma propre puisqu'on élimine la contamination due à l'érosion des électrodes. Un autre avantage majeur est l'obtention d'un plasma ayant un bilan densité sur puissance relativement grand par rapport aux autres types de décharges d'où lui vaut le nom de plasma à haute densité. À partir d'une source électromagnétique de l'ordre du kilowatt on obtient des densités électroniques supérieures à 10^{10} cm^{-3} alors qu'à même puissance un plasma capacitif, dépendamment du mélange de gaz, génère une décharge de densité électronique comprise entre 10^8 cm^{-3} et 10^{10} cm^{-3} [26]. Finalement, l'utilisation d'une source de plasma alloue la possibilité d'ajouter une électrode polarisée en radiofréquence pour contrôler l'énergie du bombardement ionique, sans toutefois perturber de façon importante les caractéristiques de la décharge. Puisque plusieurs configurations de réacteurs sont couramment utilisées, attardons-nous un instant sur trois

configurations particulières (fig. 7) soit les plasmas à résonance cyclotronique électronique, hélicon et à couplage inductif. La différence fondamentale entre ces trois sources de plasma repose uniquement sur le détail du processus physique par lequel le champ électromagnétique transfère son énergie à la décharge.

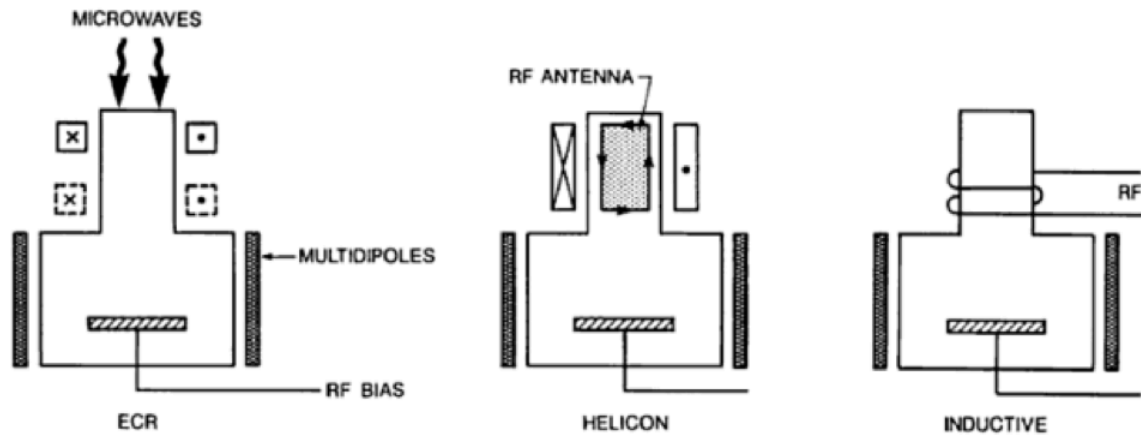


Figure 7. Configuration des principales sources de plasma à haute densité [27]. a) Réacteur à résonance cyclotronique électronique, b) Réacteur Hélicon, c) Réacteur à couplage inductif.

Dans un premier temps, les plasmas à résonance cyclotronique électroniques (ECR) exigent la présence d'un champ magnétique B stationnaire qui définit la fréquence de résonance ω_{RCE} selon la relation suivante :

$$\omega_{RCE} = \frac{eB}{m_e} \quad (2)$$

où e est la charge élémentaire de l'électron et m_e est sa masse. Ce champ magnétique impose un mouvement de giration aux électrons et un choix astucieux de la fréquence électromagnétique d'opération permet de mettre en phase le mouvement des électrons et le champ électrique de l'onde électromagnétique qui a été polarisée circulairement. Cette onde est guidée vers le gaz et pénètre l'enceinte au travers d'une paroi diélectrique généralement constituée de silice fondue. Dans le référentiel des électrons, le champ

électrique de l'onde est constant ce qui implique un couplage onde-électrons optimal. On maintient traditionnellement ces plasmas avec une onde de 2.45 GHz ce qui impose un champ $B = 875$ Gauss (éq. 2). Les plasmas ECR sont fréquemment utilisés comme sources pour les faisceaux d'ions puisque leur densité électronique peut atteindre 10^{13} cm⁻³. On l'utilise également pour la gravure réactive de divers matériaux [28-30] puisque la haute densité électronique permet de générer un fort flux ionique de basse énergie ce qui conduit à une vitesse de gravure élevée en plus d'une excellente sélectivité.

Les plasmas hélicon sont également créés par la propagation d'une onde électromagnétique dans un milieu gazeux magnétisé. Par contre, contrairement au plasma ECR, l'onde est excitée par une antenne collée sur les fenêtres diélectriques de l'enceinte. Cette antenne opérant à 13.56 MHz permet d'exciter un mode siffleur (whistler wave) qui se propage à très basse fréquence. En augmentant la puissance à l'antenne, on passe du mode de couplage capacitif, vers un mode inductif et finalement vers le mode hélicon. L'apparition de chacun de ces modes se manifeste par des sauts brusques de la densité électronique qui peut atteindre jusqu'à 10^{14} cm⁻³ en mode hélicon [31]. Cette haute densité d'espèces chargées en fait également un excellent candidat pour servir de source à faisceau d'ions [32] ainsi que pour les moteurs à propulsion ionique [33]. À titre de référence, on retrouve également dans la littérature plusieurs études sur la gravure réactive par plasma hélicon [34-37].

1.2.2 Plasma à couplage inductif (ICP)

On présente dans cette section le réacteur à plasma à couplage inductif Oxford Plasmalab 100 model ICP380 (fig. 8). Ce réacteur peut être utilisé pour des procédés de gravure de divers matériaux ainsi que pour réaliser du dépôt en phase vapeur assisté par plasma ce qui

en fait un outil tout usage très intéressant à la fois pour l'industrie et la recherche fondamentale.

L'entrée des gaz est située dans le haut du réacteur, c'est à ce même endroit où la génération du plasma est effectuée à l'aide de la bobine RF fonctionnant à 2 MHz et fonctionnant à des puissances entre 500W et 2000W. La bobine génère un champ magnétique alternatif qui induit un champ électrique d'où le nom de couplage inductif. Contrairement aux plasmas ECR et hélicon, aucun champ magnétique statique n'est requis par ce type de réacteur. Cette différence implique que le réacteur ICP doit se trouver dans un régime de densité électronique entre 10^{11} et 10^{12} cm^{-3} pour fonctionner en régime inductif, faute de quoi on demeure en régime capacitif. Par mesure de sécurité, une cage de Faraday est installée autour de la bobine pour empêcher la radiation de se propager à l'extérieur de l'enceinte. Le transport du plasma s'effectue par diffusion vers le bas du réacteur où est installé le porte-substrat et la sortie du gaz vers la pompe. Le porte-substrat est alimenté par une tension de polarisation RF à 13.56 MHz dont l'intensité est ajustable entre 50V et 500V.

Le matériau à traiter est disposé sur le porte-substrat et est inséré dans le réacteur à partir d'une chambre intermédiaire de dimension beaucoup plus petite que le réacteur. Cette façon de procéder permet de diminuer grandement le temps de chargement/déchargement de l'échantillon et surtout d'empêcher de contaminer le réacteur à chaque fois qu'on effectue cette opération. Le dessous du porte-substrat est doté d'un système de refroidissement ce qui permet de garder le matériau traité à une température suffisamment basse pour ne pas engendrer de dégradation due au chauffage par le bombardement ionique. Selon les conditions exigées par le procédé, le refroidissement peut être réalisé soit par un système à liquide caloporteur ou bien par un système fonctionnant à l'azote ou hélium liquide. Les parois du réacteur sont recouvertes d'aluminium anodisé, ce qui a pour

effet d'améliorer la résistance à l'usure, à la corrosion et à la température à ces surfaces [38]. Ces propriétés sont essentielles pour améliorer la durée de vie du réacteur ainsi que pour limiter la contamination de la décharge par des produits provenant des parois.

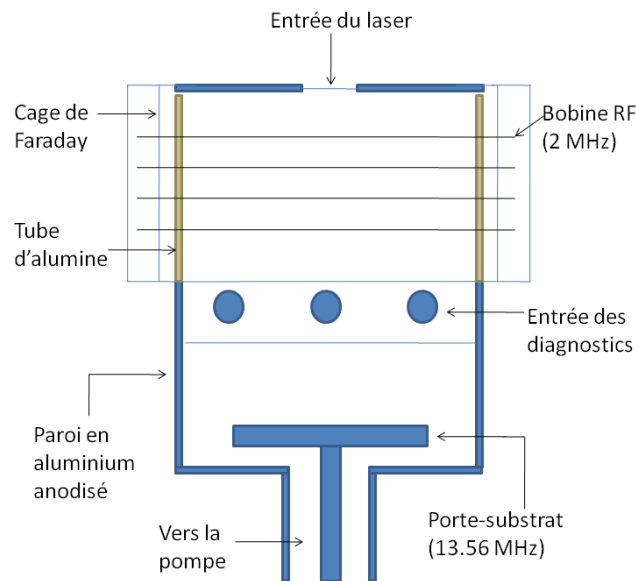


Figure 8. Schéma du réacteur

La présence de trois hublots d'observation permet l'installation de divers outils de diagnostic. Par exemple, il est possible d'installer dans ces ports [39] un spectromètre de masse, une sonde de Langmuir ou une fibre optique pour effectuer des mesures de caractéristiques du plasma. L'installation de fenêtres de silice fondue permet également de diagnostiquer la décharge par spectrométrie optique. Ces fenêtres sont également adaptées pour l'installation d'un ellipsomètre permettant l'analyse in situ en temps réel de l'échantillon. Finalement, on note la présence d'une fenêtre dans le haut du réacteur qui permet de suivre en temps réel l'évolution de l'épaisseur gravée à partir de l'analyse interférométrique de la réflectance produite par un laser He-Ne.

La polyvalence des plasmas à couplage inductif est mise en évidence par la quantité astronomique d'articles présentant les divers procédés possibles à partir de ce type de source. On retrouve aussi bien des ouvrages portant sur la gravure par pulvérisation ionique [39-42], la gravure réactive spontanée et la gravure réactive assistée par bombardement ionique [43-46] que sur l'étude de la croissance de couches minces par dépôt en phase vapeur assisté par plasma [47-49] et l'implantation ionique [50].

À titre informatif, bien que les trois types de sources plasma présentées exploitent différents phénomènes physiques pour le chauffage des électrons, il fut démontré dans un article judicieusement intitulé, « Does high density-low pressure etching depend on the type of plasma source? », que pour des paramètres identiques à la frontière gaine-substrat on obtient une gravure identique [51] indépendamment du type de réacteur utilisé. En résumé, un simulateur de gravure et dépôt adapté à un ou l'autre de ces types de sources lui confère automatiquement la compatibilité pour l'étude de n'importe quel procédé par source de plasma à haute densité.

1.2.3 Autres types de plasmas utilisés en microfabrication

Depuis le développement des méthodes de microfabrication par plasma dans les années 1970, plusieurs chercheurs ont tenté de développer, en vain, de nouveaux types de décharges pour l'amélioration des procédés. Bien que la plupart de ces méthodes ne soient pas utilisées en industrie, certaines de celles-ci sont potentiellement, pour certaines applications bien ciblées, plus efficaces que les sources de plasma à haute densité et basse pression. Voici une liste de références de quelques études intéressantes à ce sujet.

Premièrement, l'utilisation de faisceaux d'ions permet une panoplie d'applications, la précision de la technique la rendant bien adaptée pour le transfert de motifs à l'échelle du

nanomètre [52, 53] autant pour la gravure de matériaux [54] et l'implantation ionique [55] que le dépôt de couche mince [56]. Bien que moins utilisées, les décharges capacitives sont également utilisées pour la gravure micrométrique [57] ainsi que pour le dépôt. Par exemple, on développe présentement des décharges capacitives à barrière diélectrique fonctionnant à la pression atmosphérique pour le dépôt de revêtement, notamment sur le bois [58]. Plusieurs groupes de chercheurs japonais [59-61] ont démontré la faisabilité de la gravure d'oxyde par un plasma d'onde de surface de configuration planaire. Ils ont pu obtenir des tranchées verticales jusqu'à 0.25 μm . Par contre, leurs recherches ont également montré la difficulté d'obtenir une bonne sélectivité. Finalement, on retrouve également des procédés de gravure opérant à pression atmosphérique pour la gravure rapide de divers matériaux tels le W, le Ta et le SiO_2 à des vitesses de gravures semblables à celles atteignables dans les systèmes à basse pression [62], mais l'uniformité des procédés est compromise par la difficulté d'obtenir une décharge homogène et stable.

1.3 Gravure

La gravure par plasma est la conséquence d'un ensemble complexe d'interactions entre les particules libres de la décharge et la surface à traiter. La compréhension de ces interactions est cruciale pour obtenir un meilleur contrôle des procédés dans le but de réduire davantage la taille minimale des motifs. Dans les prochaines sections, on s'intéresse aux trois mécanismes physiques responsables de la gravure (fig. 9) dans les procédés de gravure par plasma [63], soit la pulvérisation par bombardement ionique, la gravure réactive spontanée et la gravure réactive assistée par bombardement ionique.

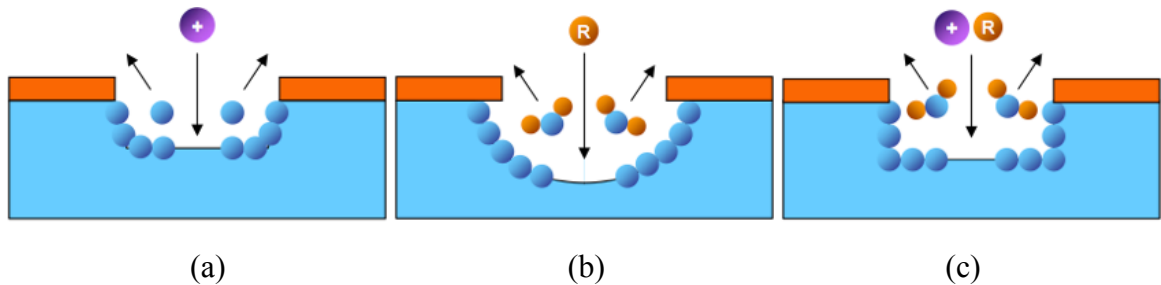


Figure 9. Schéma des différents mécanismes de gravures. a) Gravure par pulvérisation par bombardement ionique, b) Gravure réactive spontanée, c) Gravure réactive assistée par bombardement ionique.

Prenons tout d'abord un instant pour définir quelques paramètres généraux utilisés pour la caractérisation des profils de gravure. Puisqu'un des avantages de la gravure sèche est de permettre une gravure anisotrope par rapport à la gravure par solution acide, on définit le degré d'anisotropie A de la façon suivante :

$$A = 1 - \frac{R_h}{R_v} \quad (3)$$

où R_h et R_v sont l'épaisseurs de matière gravée horizontalement et verticalement respectivement comme défini à figure 10. Comme nous le verrons plus loin, la gravure par bombardement ionique favorise l'anisotropie du profil alors qu'une gravure purement réactive favorise une gravure isotrope. La vitesse de gravure de la surface est la mesure de l'épaisseur de matériau gravé par unité de temps :

$$T = \frac{\text{Épaisseur de matériau gravé}}{\text{Temps de gravure}} \quad (4)$$

Cette vitesse, généralement exprimée en nm/s est le paramètre privilégié par l'industrie puisque c'est celui-ci qui limite le volume quotidien de production des composants. La sélectivité S représente le rapport entre les vitesses de gravure du masque et du matériau :

$$S = \frac{\text{Vitesse de gravure du masque}}{\text{Vitesse de gravure du matériau}} \quad (5)$$

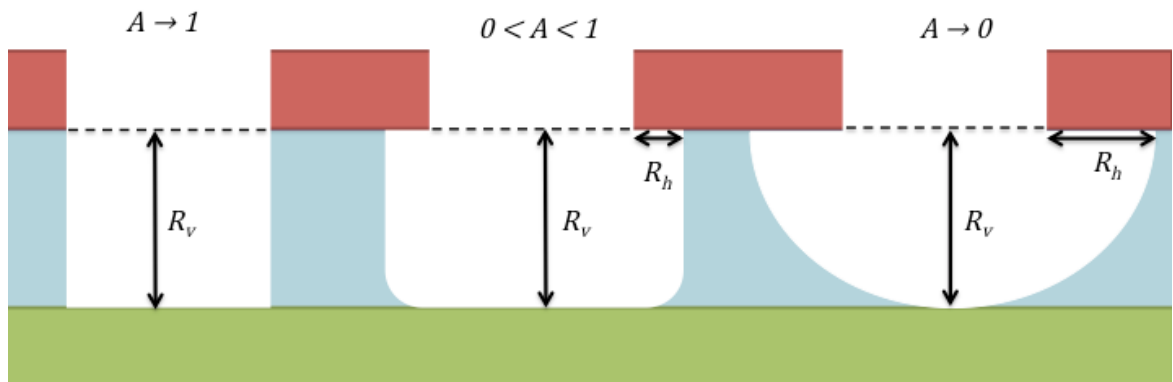


Figure 10. Impact du degré d'anisotropie A sur la topographie du profil. R_h et R_v représentent l'épaisseur gravée respectivement dans la direction horizontale et verticale.

1.3.1 Pulvérisation par bombardement ionique de basse énergie

La pulvérisation, aussi nommée gravure physique, consiste à retirer de la matière d'une surface en la bombardant de particules énergétiques. Les particules incidentes transfèrent leur énergie aux atomes de la surface par le biais de collisions élastiques et inélastiques. Les atomes sont ainsi pulvérisés lorsqu'ils acquièrent une énergie supérieure à leur énergie de sublimation ce qui leur permet de rompre les liens avec la surface et se déplacer librement vers la phase gazeuse (fig. 11). Dans les plasmas à haute densité, les espèces neutres possèdent une énergie insuffisante pour graver physiquement une surface puisque leur énergie, purement thermique, est très inférieure à l'énergie de déplacement des atomes du solide. Par contre, la présence d'une haute densité ionique amène un flux important d'ions aux surfaces polarisées. En effet, l'insertion d'un élément conducteur dans le gaz ionisé implique automatiquement l'apparition spontanée d'une gaine dans laquelle les ions sont accélérés par le champ électrique. Puisque l'accélération des

particules se fait par un champ électrique, on utilise généralement le terme pulvérisation ionique, bien que la description physique d'une collision entre particule neutre à haute énergie et le matériau soit identique. Par exemple, après avoir gagné une certaine énergie dans la gaine, un ion peut être neutralisé avant d'entrer en collision avec la surface.

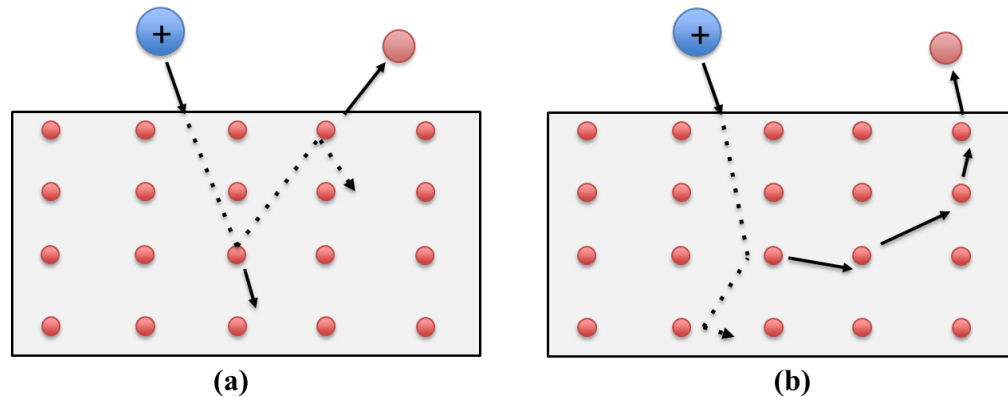


Figure 11. Schéma des régimes de pulvérisation à basse énergie
a) Régime de collision simple, b) Régime de cascade linéaire de collisions

Dans les plasmas à haute densité, l'énergie des ions lors de leur collision avec la surface est contrôlée par la tension de polarisation du porte-substrat. On utilise typiquement des tensions de polarisation comprises entre 75 V et 500 V. Cette gamme d'énergie est considérée comme étant basse par rapport aux méthodes traditionnelles de pulvérisations telles que les faisceaux d'ions et les décharges capacitatives dans lesquelles l'énergie des ions incidents est supérieure au keV. On définit le rendement de pulvérisation Y de la façon suivante :

$$Y = \frac{\text{Flux d'atomes pulvérisés}}{\text{Flux d'ions incidents}} = \frac{\Gamma_i}{\Gamma_s} \quad (6)$$

où Γ_i est le flux d'ions et Γ_s est le flux de particules pulvérisées de la surface. Par exemple, pour la pulvérisation de Si par Ar^+ à 100 eV le rendement est de ~ 0.12 alors qu'on obtient respectivement des rendements de ~ 0.27 et ~ 0.056 pour Cu et Al [64] avec des ions de

même énergie. On note que cette mesure représente le rendement de gravure moyen, en réalité le changement de composition et de rugosité de la surface fait en sorte que le rendement varie tout au long du procédé. Dans les systèmes de gravure par plasma à basse énergie la mesure du rendement de pulvérisation peut être obtenue en temps réel par la mesure du changement de masse Δm à l'aide d'une microbalance à quartz [65] :

$$Y = \frac{\Delta m}{M_0 \Phi_i} N_0 \quad (7)$$

où M_0 est la masse atomique de la cible, N_0 est le nombre d'Avogadro et Φ_i est la fluence d'ions sur la surface entre les deux mesures de masses. Cette équation est valide si l'augmentation de masse par implantation et capture des ions incidents est négligeable devant la masse de la cible ce qui est une hypothèse valide pour le bombardement par des ions massifs à basse énergie. Plusieurs ouvrages de la littérature scientifique portent sur la détermination d'une relation semi-empirique du rendement de pulvérisation. La première théorie fut proposée par Sigmund en 1969 [66] et permettait de bien estimer les rendements de pulvérisation pour des énergies d'ions incidents $\gtrsim 1$ keV.

Depuis ce temps, plusieurs chercheurs ont affiné le modèle de Sigmund pour rendre compte des effets de seuil lors de la pulvérisation à basse énergie. Une étape importante fut l'introduction du concept d'énergie seuil de pulvérisation par Matsunami en 1980 [67]. Un modèle particulièrement intéressant fut proposé par Zhang et Zhang en 2004 [68], [69]. En effet, ce modèle permet de rendre compte du rendement de gravure pour une gamme d'énergie E quelconque des ions incidents. De plus, cette formulation est actuellement celle qui permet le meilleur accord avec les données expérimentales quant au calcul des distributions en énergie et en angle des particules éjectées de la surface. On reviendra en détail sur ce modèle dans la section 3.2.2 lorsque nous présenterons le modèle de la pulvérisation dans le simulateur de profil de gravure.

Pour conclure cette section, notons quelques avantages de la pulvérisation à basse énergie par rapport aux systèmes à haute énergie tels que les faisceaux d'ions. Premièrement, on note la minimisation de la contamination du matériau par l'implantation ionique, une meilleure sélectivité et la facilité du traitement des gaz pompés de la décharge puisqu'on utilise généralement des gaz inerte tel l'argon pour effectuer la gravure. Par contre, les vitesses de gravure et le degré d'anisotropie sont généralement trop faibles pour que l'on puisse recourir à cette méthode en industrie. C'est pourquoi on se tourne souvent vers des systèmes réactifs que nous introduirons dans les prochaines sections.

1.3.2 Gravure réactive

La gravure réactive consiste à éroder la surface à l'aide de réactions chimiques entretenues par les radicaux réactifs provenant de la phase gazeuse. Ces radicaux, majoritairement à l'état neutre, sont créés par dissociation par impact électronique dans la décharge. Ce flux de particules neutres réactives engendre une gravure isotrope similaire à ce qu'on obtient dans les systèmes de gravure par solution liquide (fig. 10). Une utilisation typique de cette méthode de gravure est celle du silicium à partir de gaz fluorés. La dissociation du gaz (F_2 , XeF_2 , SF_6 , ...) crée des radicaux F qui s'adsorbent à la surface du Si, la gravure s'effectuant par désorption de produits SiF_x . Le produit de gravure dominant est le SiF_4 qui est un composé hautement volatil, facilement pompé hors de l'enceinte. La gravure réactive est utilisée autant pour la gravure de métaux [70], [71] que pour la gravure d'oxydes [71], [72] et la gravure de matériaux diélectriques [73], [74].

1.3.3 Gravure réactive assistée par bombardement ionique

La gravure réactive assistée par bombardement ionique est le phénomène physique par lequel la vitesse de gravure d'un matériau sous l'effet combiné d'un flux de radicaux et d'ions énergiques est plus grande que la somme des vitesses de gravure individuelles. Puisque l'exposition au plasma implique inévitablement un bombardement ionique de la surface, la gravure purement réactive d'un matériau est rarement observée. Ainsi, pour décrire correctement la cinétique de surface, on doit prendre en compte le transfert d'énergie des ions aux atomes de surfaces.

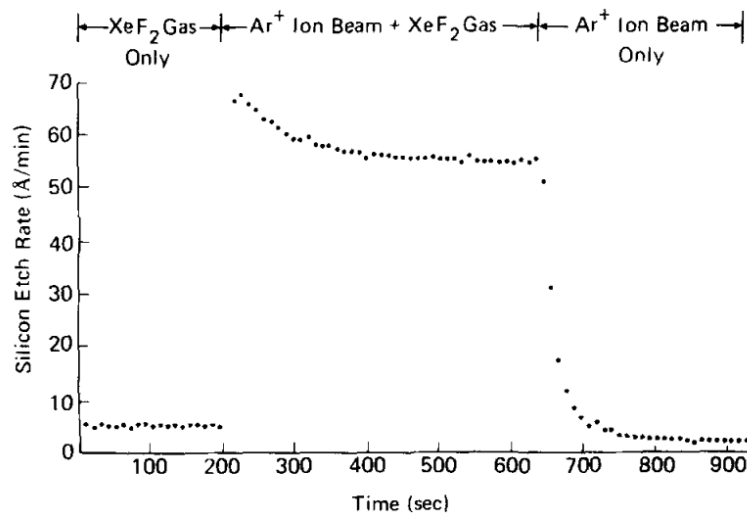


Figure 12. Mesure de vitesses de gravures démontrant le phénomène de gravure assisté par bombardement ionique [75].

Ce phénomène fut exposé pour la première fois par Coburn et Winters en 1979 [75]. Dans cette expérience maintenant classique, à l'aide d'une décharge de XeF₂ et d'un faisceau d'ions Ar⁺, on a pu découpler chacun des mécanismes de la gravure du Si et ainsi démontrer cet effet de synergie entre la chimie de surface et le bombardement ionique (fig.

12). Ce type de gravure est tout à fait indiqué pour les sources à couplage inductif dans lesquelles le bombardement ionique provient directement de la décharge avec une accélération due à l'application d'une tension de polarisation au niveau du porte-substrat [76-79]. Les produits de gravures dans de tels systèmes sont généralement volatils et ne causent pas de redépôt indésirable sur les parois, ce qui est un avantage marqué par rapport à la pulvérisation pour plusieurs applications. Pour ce faire, les choix du mélange gazeux et de l'énergie de bombardement ionique doivent être ajustés de façon à obtenir une grande vitesse de gravure tout en limitant les produits de gravures non volatils (fig. 13).

Materials to be etched	Chemical gases (multi choices)
Single-crystal silicon	CF ₃ Br, HBr/NF ₃ , SF ₆ /O ₂
Polysilicon	SiCl ₄ /Cl ₂ , BCl ₃ /Cl ₂ , HBr/Cl ₂ /O ₂ , HBr/O ₂ , Br ₂ /SF ₆
Al	SiCl ₄ /Cl ₂ , BCl ₃ /Cl ₂ , HBr/Cl ₂
Al-Si-Cu, Al-Cu	BCl ₃ /Cl ₂ + N ₂
W	SF ₆ , NF ₃ /Cl ₂
TiW	SF ₆
WSi ₂ , TiSi ₂ , CoSi ₂	CCl ₂ F ₂ /NF ₃ , CF ₄ /Cl ₂
SiO ₂	CCl ₂ F ₂ , CHF ₃ /CF ₄ , CHF ₃ /O ₂ , CH ₃ CHF ₂
Si ₃ N ₄	CF ₄ /O ₂ , CF ₄ /H ₂ , CHF ₃ , CH ₃ CHF ₂
GaAs	SiCl ₄ /SF ₆ , SiCl ₄ /NF ₃ , SiCl ₄ /CF ₄
InP	CH ₄ /H ₂
Photoresists	O ₂

Figure 13. Différents gaz utilisés dans les systèmes de gravure réactive assistés par bombardement ionique [80].

1.4 Dépôt

La matière déposée dans les procédés de microfabrication est mieux connue sous le nom de couche mince. En fonction de l'application visée, l'épaisseur d'une couche mince peut être de quelques nanomètres, auquel cas la couche est formée de quelques monocouches

d'atomes, jusqu'à plusieurs micromètres. À l'instar de la gravure, plusieurs mécanismes physiques sont responsables du dépôt de matière. Selon le mécanisme en cause, on distingue entre deux catégories de dépôt, soit le dépôt chimique ou le dépôt physique. Le dépôt chimique consiste à faire croître une couche mince en exposant la surface à plusieurs précurseurs provenant de la phase gazeuse. Le contrôle des réactions chimiques aux surfaces permet ainsi de faire croître divers matériaux sous différents type de structures cristallines ou non [81-85]. Le dépôt physique, contrairement au dépôt chimique, ne requiert pas de chimie particulière de surface, puisqu'il s'agit d'une simple condensation de vapeur sur une surface. Tout comme dans les procédés chimiques, le contrôle des conditions de croissance, comme la température du substrat et l'énergie des particules déposées, permet de déposer différents types de matériaux dans différentes structures [15, 86-89]. On présente sur la figure 14, différents exemples de techniques de dépôt de couche mince. Pour une description plus détaillée de chacune de ces techniques et de plusieurs autres techniques, on peut se référer au livre de Vossen et Kern, « Thin film processes II » [90].

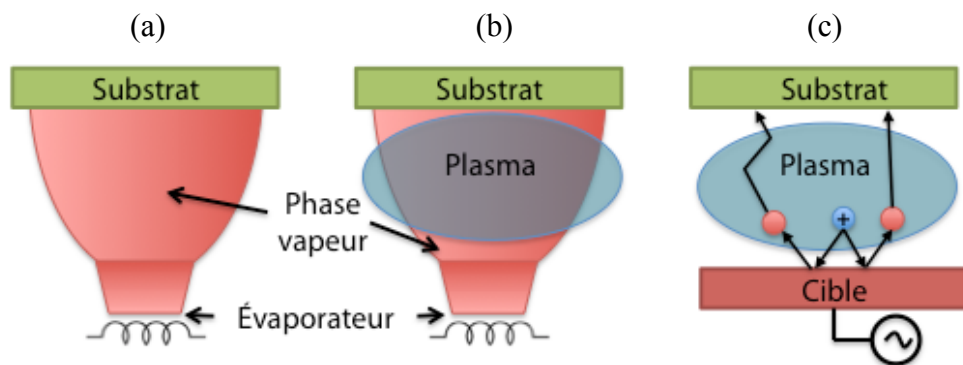


Figure 14. a) Dépôt chimique ou physique par phase vapeur. b) Dépôt chimique ou physique en phase vapeur assisté par plasma. c) Dépôt par pulvérisation plasma.

Pour conclure cette section, nous présentons différents paramètres pour la description des profils lors du remplissage de tranchées. En se référant à la figure 15, on définit les

paramètres suivants pour la description du profil lors du remplissage par dépôt dans une tranchée isolée.

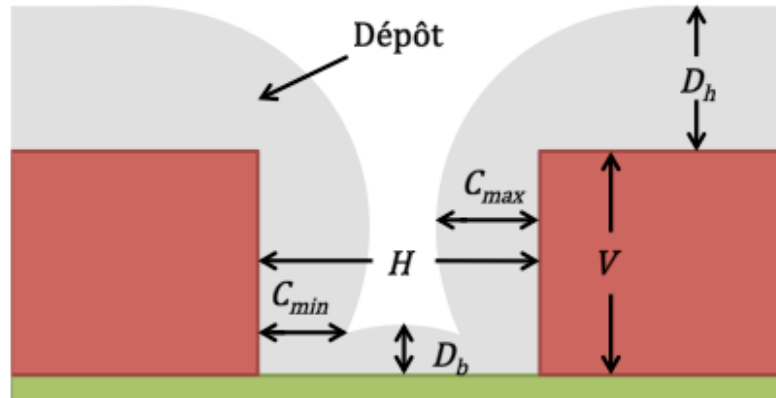


Figure 15. Paramétrisation du profil de remplissage d'une tranchée simple de rapport d'aspect V/H . D_b et D_h sont les mesures d'épaisseur du dépôt respectivement dans le bas de la tranchée et sur le haut du masque du motif à déposer. C_{min} et C_{max} sont les tailles caractéristiques de la mesure d'épaisseur du dépôt sur les parois de la tranchée.

$$\text{Degré de couverture de marche} = \frac{D_b}{D_h}, \quad (8)$$

$$\text{Degré de couverture des parois} = \frac{C_{min}}{D_h}, \quad (9)$$

$$\text{Degré de cambrure} = \frac{C_{max} - C_{min}}{C_{max}}. \quad (10)$$

Dans le cas du remplissage d'une série de tranchées, on paramétrise le profil final en regardant la vue globale (fig. 16) et en définissant le degré de planéité.

$$\text{Degré de planéité} = \frac{H_{min}}{H_{max}}. \quad (11)$$

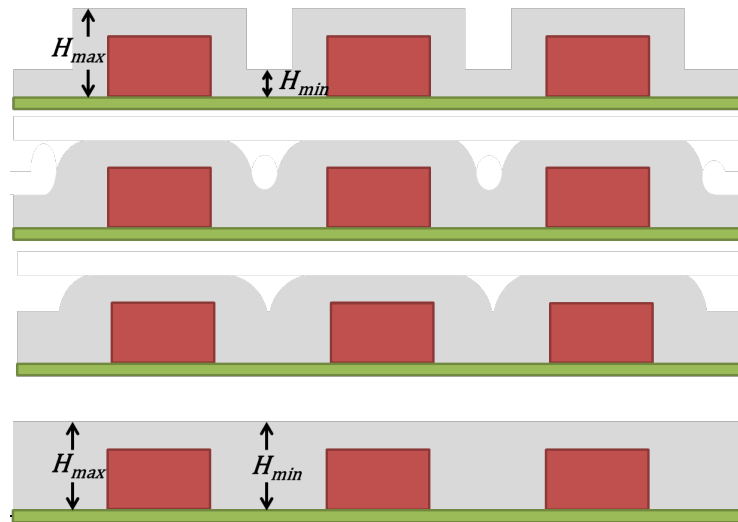


Figure 16. Paramétrisation du profil de remplissage d'une série de tranchées. H_{max} et H_{min} sont les tailles respectives du maximum et minimum d'épaisseur du dépôt.

1.5 Gravure ionique réactive profonde

La gravure ionique réactive profonde est une technique permettant d'atteindre des profils à fort rapport d'aspect (>25) [91, 92]. Le développement de cette nouvelle technique fut crucial pour l'explosion de l'industrie des MEMS [93] qui nécessite des tranchées profondes et verticales, par exemple pour les structures en porte-à-faux dans les accéléromètres [94] et les micro capteurs de pression [95].

1.5.1 Procédé Bosch

La technique de gravure réactive profonde la plus connue est sans aucun doute le procédé Bosch qui consiste à exposer la surface par alternance à une décharge de (SF_6) et de (C_4F_8) (fig. 17).

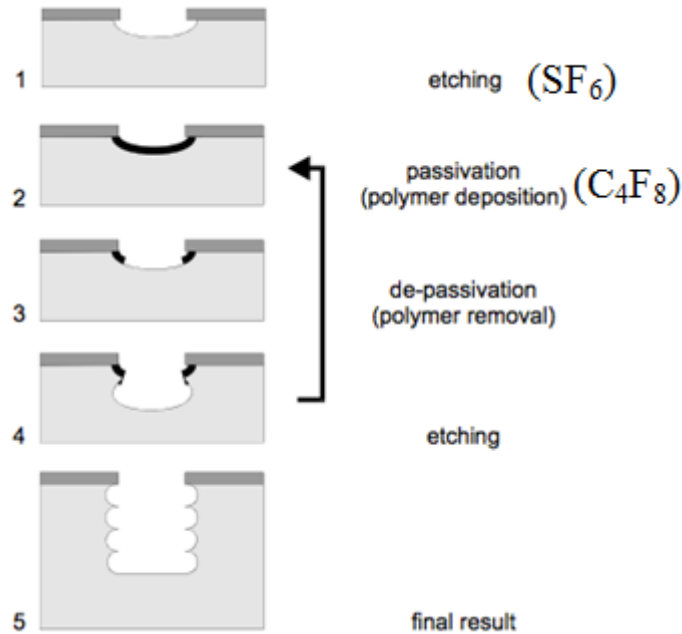


Figure 17. Schéma des étapes du procédé de gravure ionique réactive profonde [96].

Dans un premier temps, la décharge de SF_6 grave la surface exposée de façon quasi isotrope. Dans le cycle suivant, le plasma de C_4F_8 dépose une couche de passivation de fluorocarbure sur les parois et au fond de la tranchée. Lors du cycle de gravure subséquent, le fond de la tranchée est rapidement découvert de la couche de passivation par le bombardement ionique, tandis que les parois peu bombardées conservent plus longtemps la couche de passivation. La gravure se poursuit alors de façon isotrope sur la surface exposée jusqu'au prochain cycle de passivation et ainsi de suite. À la fin du procédé on expose l'échantillon à un plasma d'oxygène pour retirer la totalité de la couche de passivation. La rugosité des parois de la tranchée est ainsi contrôlée par le temps de cycle du procédé : plus ce temps est court, moins les parois seront rugueuses. Une optimisation quant au rapport de temps entre chacun des cycles doit aussi être effectuée puisqu'un temps d'exposition trop long à la décharge de C_4F_8 peut entraîner un bilan de

dépôt de matière. À l'autre extrême, un temps trop court protège insuffisamment les parois, ce qui engendre une chute du degré d'anisotropie de la tranchée.

1.5.2 Gravure cryogénique

Le concept fondamental de la gravure cryogénique est le même que celui du procédé Bosch soit l'augmentation du degré d'anisotropie par passivation des parois. Par contre, contrairement au procédé Bosch, la passivation des parois et la gravure de la tranchée s'effectuent de façon simultanée à l'aide d'une seule décharge (fig. 18).

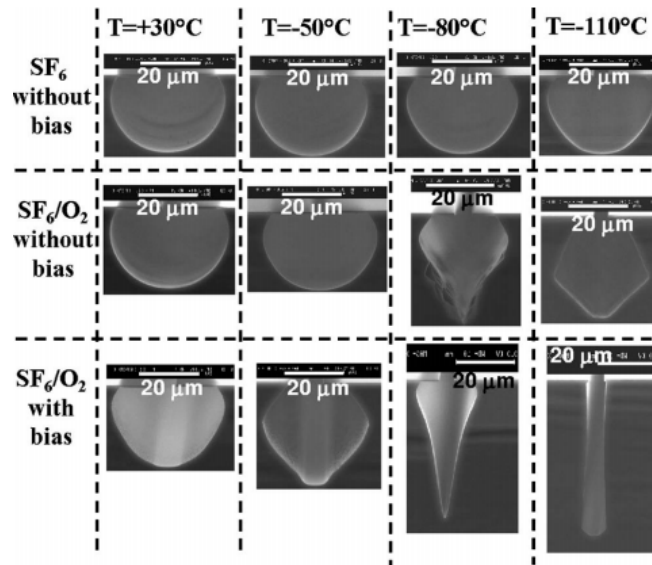


Figure 18. Démonstration de l'effet combiné du bombardement ionique et de la passivation des parois dans la méthode de gravure cryogénique du Si [97]

Pour la gravure du silicium, le procédé cryogénique fonctionne à l'aide d'un mélange de SF₆ et O₂. Comme son nom l'indique, ce procédé consiste à refroidir le substrat à très

basse température ($< -100\text{ }^{\circ}\text{C}$) à laquelle un composé de forme SiO_xF_y se dépose sur la surface exposée. Tout comme dans le procédé Bosch, le bombardement ionique du fond de la tranchée permet de détruire la couche de passivation et de poursuivre la gravure par les radicaux fluorés. La chimie de la couche limite son épaisseur à quelques monocouches, ce qui permet d'obtenir des tranchées verticales à fort rapport d'aspect (> 10) et peu rugueuses ($< 5\text{ nm}$) [97]. Ceci est également rendu possible grâce à l'excellente sélectivité du procédé. La couche de passivation est simplement spontanément désorbée lorsque l'échantillon revient à la température ambiante.

1.6 Imagerie des profils par microscopie électronique à balayage

Pour obtenir une image détaillée des profils des composantes, il est nécessaire d'utiliser une méthode d'imagerie avec une résolution de l'ordre du nanomètre. La microscopie électronique à balayage (MEB) est la méthode privilégiée pour effectuer les clichés des profils puisqu'en plus de fournir une résolution suffisante, la préparation des échantillons est simple et permet de préserver l'intégrité de la surface à observer. La première étape consiste à préparer l'échantillon en effectuant une coupe transversale. On utilise généralement une microscie à lame de diamant, qui permet d'obtenir une coupe d'une rugosité de l'ordre du micromètre. Selon le type de surface, un polissage peut être effectué pour réduire la rugosité de la surface dans le but d'améliorer la qualité de l'image. On distingue deux méthodes de polissage : l'une mécanique, effectuée avec un papier de verre à micrograins, et l'autre par pulvérisation par bombardement ionique. Une fois coupé, l'échantillon est inséré dans le microscope qui opère dans une enceinte sous vide. Le principe de fonctionnement dans sa forme la plus simple est le suivant, il suffit de

bombarder la surface d'électrons et de mesurer le flux d'électrons réémis de la surface (fig. 19).

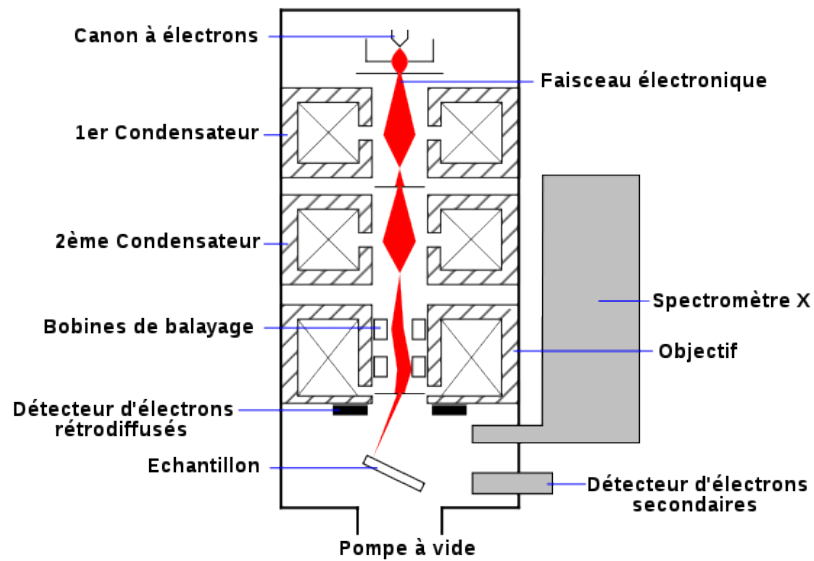


Figure 19. Schéma d'un microscope à balayage électronique

Les électrons primaires sont générés par émission thermoïonique à partir d'un filament de tungstène. Un ensemble de lentilles électromagnétiques permet de focaliser le faisceau d'électrons et de balayer la surface sans déplacer l'échantillon. Le système de détection permet de distinguer entre les électrons secondaires produits par effet photoélectrique à la surface et les électrons simplement rétrodiffusés de la surface (fig. 20). L'imagerie par électron secondaire fournit une représentation fidèle de la surface en produisant des images dont le contraste révèle la topographie de l'échantillon. L'énergie des électrons rétrodiffusés varie proportionnellement à la masse de la cible, l'imagerie par électrons rétrodiffusés produit des images dont le contraste fait apparaître les différents éléments composant la surface. Pour la prise d'image de profils de gravure ou dépôt, on privilégie la mode de fonctionnement par rétrodiffusion qui permet de bien mettre en évidence les surfaces de contact entre les différents matériaux.

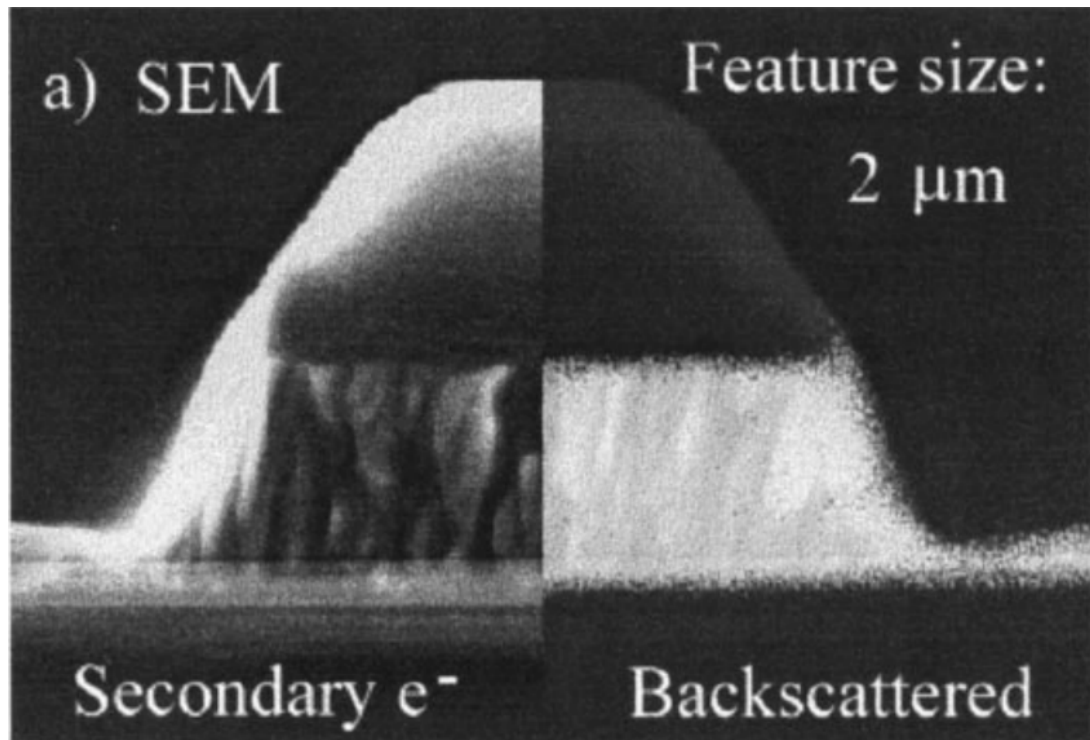


Figure 20. Comparaison entre les deux modes de fonctionnement du microscope à balayage électronique [98].

1.7 Défauts des profils

Lors de la gravure de tranchées à fort rapport d'aspect ($R \geq 3$), plusieurs phénomènes causent des non-uniformités du profil qui ne sont normalement pas observables sur des profils à faibles rapports d'aspect. En se référant à la figure 21, on scinde ces défauts de gravure en trois catégories distinctes selon le phénomène physique en cause [71]. Dans la première colonne de cette figure, on présente les défauts causés par les particules énergétiques, qui sont responsables de la pulvérisation de la surface. Bien que ces particules soient majoritairement dirigées perpendiculairement à la surface, elles ont tout de même une légère dispersion angulaire autour de la normale lors de l'impact avec la surface.

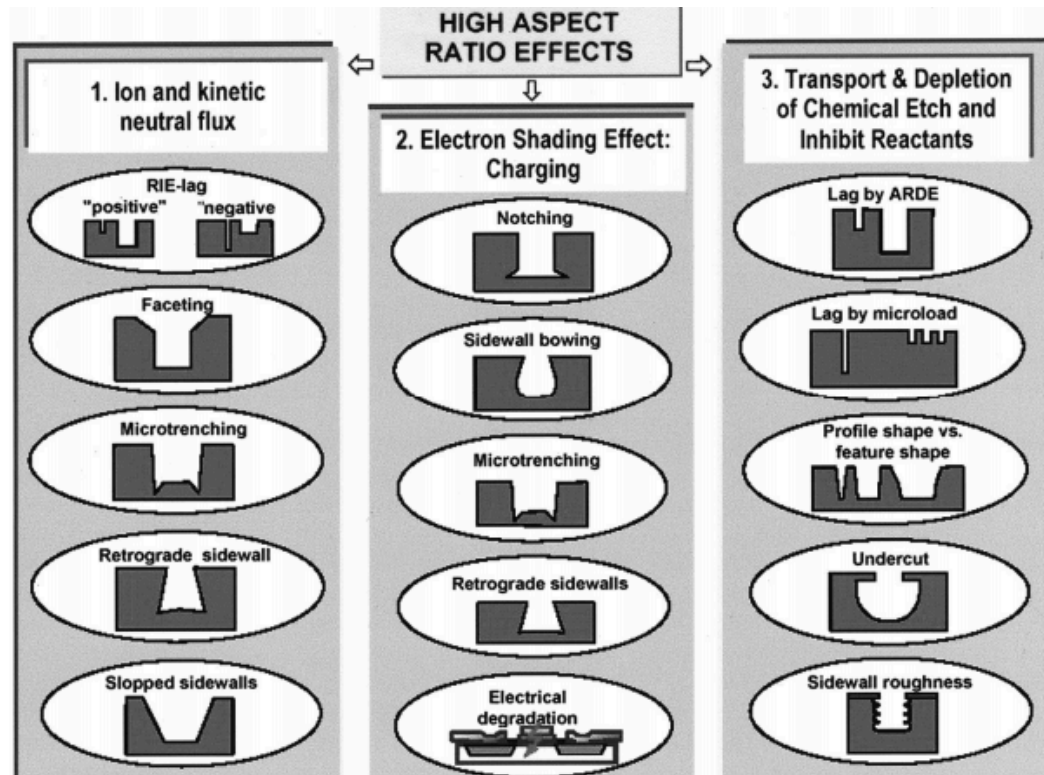


Figure 21. Principaux défauts de gravures associés à la gravure à fort rapport d'aspect [99].

Cette dispersion, combinée avec la dépendance angulaire du rendement de pulvérisation et la réflexion spéculaire des ions à incidence rasante sur les parois, a pour effet de causer des défauts tels que les microtranchées [100], le clivage des parois [101] et l'obtention de parois en angle [102].

La deuxième colonne présente les anomalies causées par la déformation du champ électrique dans la gaine entourant les motifs. Ce phénomène est attribuable au chargement non uniforme de la surface dû à l'effet d'écrantage des électrons présents dans la gaine. Cette déformation du champ dévie les ions incidents et fait apparaître des défauts tels que l'entaillage du fond de la tranchée (notching), le bombement des parois [103] (sidewall bowing), la formation de parois obliques rétrogrades [99] et la déviation de la direction de

gravure [104] (twisting). Finalement, la troisième colonne de la figure 21 met en évidence les défauts causés par le transport des particules réactives dans le motif. Ce phénomène est directement révélé par la dépendance du rapport d'aspect sur la vitesse de gravure [105], en particulier dans les systèmes de gravure ionique réactive profonde. On note également les effets du dépôt d'une couche de passivation ce qui empêche les radicaux d'atteindre la surface et occasionne une réduction de la vitesse de gravure [106]. Lors du dépôt de couches minces, on observe également plusieurs phénomènes qui ont pour conséquence de conduire à des profils non idéaux. Sans entrer dans les détails, notons que des phénomènes semblables à ceux énumérés précédemment en sont la cause. A titre de référence, quelques exemples sont présentés sur la figure 22. En somme, la compréhension de chacun des phénomènes entraînant des défauts dans les profils est essentielle puisqu'elle permettra de guider la conception du simulateur de profil en mettant en évidence les mécanismes dominants lors de la gravure et du dépôt.

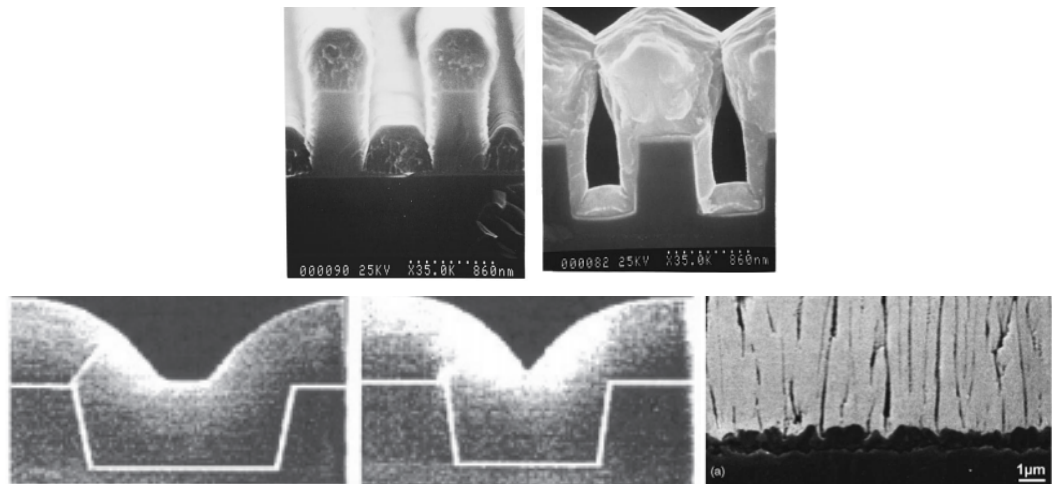


Figure 22. Principaux défauts de profils des procédés de dépôts. a) Microtranchée formée lors du dépôt par faisceau d'ions [106] b) Formation de cavité lors du dépôt physique en phase vapeur [107] c) Effet du rapport d'aspect de la tranchée sur la planéité de la couche [108] d) Formation de fissures et dislocations lors de la croissance [109]

CHAPITRE 2.

MÉTHODE DE SIMULATION PARTICULAIRE DE TYPE «PARTICLE-IN-CELL»/MONTE-CARLO

On consacre ce chapitre à la présentation générale de la méthode de simulation particulaire de type « particle-in-cell »/Monte-Carlo. Dans un premier temps, on présente les concepts fondamentaux de la méthode « particle-in-cell » tels qu'ils furent appliqués lors de la conception de notre simulateur de profil. Ce type de simulation, par son caractère stochastique, implique le recours à la méthode de Monte-Carlo, de sorte que dans un deuxième temps, on s'attardera sur les principes fondamentaux de cette dernière.

2.1 Généralités sur les simulations particulières de type « Particle-in-Cell »

La simulation dite « particle-in-cell » (PIC) est un outil puissant et polyvalent qui permet l'étude de systèmes physiques constitués d'un très grand nombre de particules chargées sur une longue échelle de temps. Comme son nom l'indique, la méthode discrétise l'espace en un ensemble de cellules comprenant chacune un grand nombre de particules. La méthode PIC consiste à déterminer le champ électromagnétique en utilisant comme information la charge et la densité de courant moyennes contenues dans chacune des cellules. Pour chaque cellule, ces informations sont calculées en effectuant la somme sur les charges individuelles qu'elle contient. Dans la méthode PIC classique non collisionnelle, l'interaction entre particules se fait sous la seule action de la force de Lorentz obtenue par la résolution du champ électromagnétique du système de cellules chargées. La méthode est utilisée dans toutes les branches de la physique des plasmas, autant au niveau de la simulation de réacteurs de laboratoires [110-115] qu'en astrophysique pour la simulation d'atmosphères stellaires [116]. L'augmentation rapide de

la puissance de calcul des microprocesseurs a fait en sorte que la méthode PIC décrit des systèmes de plus en plus complexes et est donc en gain de popularité (fig. 23). On pense par exemple à des systèmes à très haute densité telle la simulation de l'interaction laser-matière lors de l'ablation laser [117], ainsi que la simulation de décharges à barrières diélectriques à la pression atmosphérique [118]. Puisque la technique est fondamentalement compatible avec le nouveau paradigme en architecture des ordinateurs, soit le haut parallélisme des unités de calculs, on effectue encore à ce jour de la recherche fondamentale théorique [119] pour l'amélioration en performance et en stabilité des simulateurs PIC.

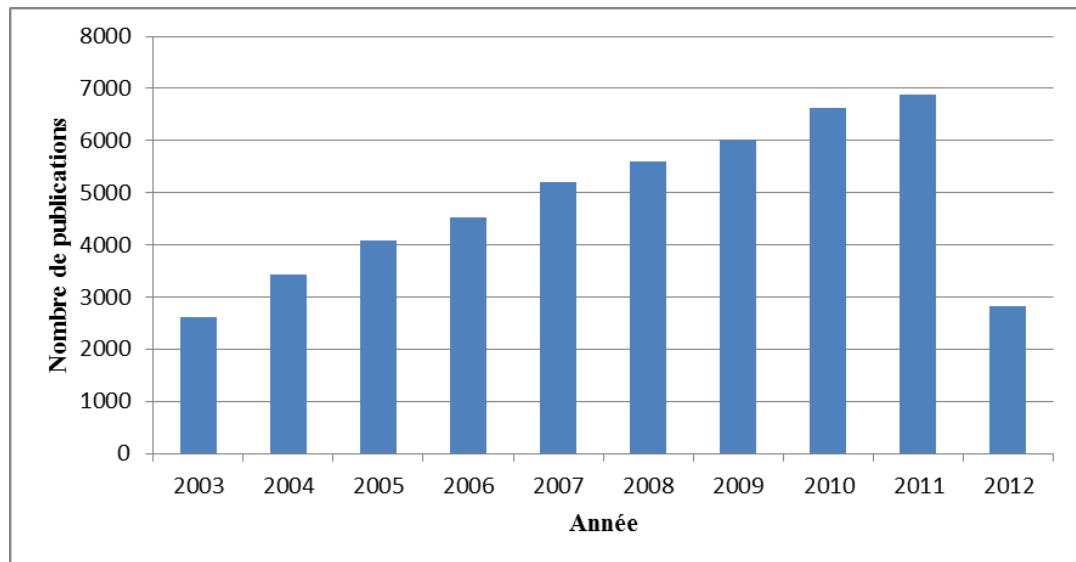


Figure 23. Nombre de publications par année contenant le mot clé «particle-in-cell» selon une recherche effectuée sur la base de données Engineering Village (15/7/2012).

Les sections suivantes se veulent une description brève des différents concepts de la méthode PIC. Pour une présentation complète et rigoureuse, on se réfèrera aux articles de Dawson [120] et Birdsall [121], tous deux étant les pionniers du domaine de la simulation particulière des plasmas.

2.1.1 Équations du mouvement

Le but fondamental du simulateur est la résolution des équations du mouvement d'un ensemble de N particules. Par souci de brièveté, on se limite ici à la présentation du cas bidimensionnel pour un plasma électrostatique classique, ce qui est suffisant pour la description du mouvement des particules à l'échelle du motif dans un plasma de haute densité à basse pression. Les équations du mouvement pour une particule i sont les suivantes :

$$\frac{dx_i}{dt} = \vec{v}_{x_i} , \quad (12)$$

$$\frac{dy_i}{dt} = \vec{v}_{y_i} , \quad (13)$$

$$\frac{d\vec{v}_{x_i}}{dt} = \frac{q_i}{m_i} (\vec{E})_{x_i} , \quad (14)$$

$$\frac{d\vec{v}_{y_i}}{dt} = \frac{q_i}{m_i} (\vec{E})_{y_i} , \quad (15)$$

où v est la vitesse des particules selon la coordonnée spatiale x ou y , q la charge de la particule, m sa masse et E le champ électrique local de la cellule. L'intégration des équations du mouvement est effectuée par l'algorithme dit du « saut de grenouille », représenté sur la figure 24 et est effectuée à partir de l'ensemble d'équations suivantes :

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \Delta t v_{x_i}^{n+\frac{1}{2}} , \quad (16)$$

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \Delta t v_{y_i}^{n+\frac{1}{2}}, \quad (17)$$

$$v_i^{n+3/2} = v_i^{n+1/2} + \Delta t \frac{q_i}{m_i} E(x_i, y_i), \quad (18)$$

où Δt est le pas de temps d'intégration. Comme nous le verrons plus loin, le choix du pas de temps n'est pas trivial et dépend des caractéristiques du système.

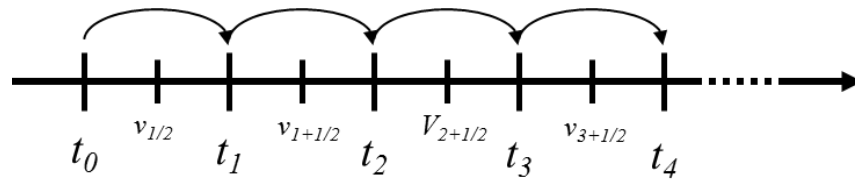


Figure 24. Schématisation de l'algorithme du « saut de grenouille ». Le nom provient du fait que la particule « saute » d'un état à un autre en utilisant la vitesse calculée à chaque demi-pas de temps.

2.1.1.1 Taille des cellules

Le choix de la taille des cellules définit la résolution spatiale du champ électrique. Puisque les plasmas à haute densité sont fortement corrélés, l'astuce est de négliger les interactions à courte distance puisque celles-ci n'influencent pas le comportement collectif du système. Cette façon de procéder accélère grandement la vitesse d'exécution du simulateur par rapport à la simulation par dynamique moléculaire qui doit tenir compte de l'interaction entre chaque couple de charges. Pour évaluer le degré de corrélation du plasma, on définit le paramètre plasma Λ (le plasma est fortement corrélé lorsque $\Lambda \gg 1$) [23] :

$$\Lambda = 4\pi n_e \lambda_d^3 \quad (19)$$

où n_e est la densité électronique et λ_d la longueur de Debye électronique qui caractérise la distance d'écrantage du champ électrostatique par les espèces chargées mobiles du plasma et est donnée par la relation suivante :

$$\lambda_d = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k_B T_e}{n_e e^2}} \quad (20)$$

où ϵ_0 est la permittivité diélectrique du vide, k_B la constante de Boltzmann, T_e la température électronique. Par exemple, dans des conditions typiques d'opération d'une décharge à couplage inductif ($n_e = 10^{11}$, $T_e = 2eV$) la valeur de Λ est de l'ordre de $4.6 \cdot 10^4$ (sans unité). Conséquemment, la taille de la cellule doit être supérieure à la longueur de Debye λ_d , on utilise typiquement des tailles de cellule $\Delta x, \Delta y$ telle que [121] :

$$\lambda_d < \Delta x, \Delta y < 3.4 \lambda_d \quad . \quad (21)$$

2.1.1.2 Pas de temps

La grandeur du pas de temps définit la fréquence maximale du phénomène physique pris en compte par la méthode PIC. Dans les plasmas, le phénomène ayant la fréquence la plus élevée est lié aux ondes de Langmuir. Ces ondes se caractérisent par l'oscillation de la densité électronique à la pulsation plasma ω_{pe} que l'on évalue par la relation suivante :

$$\omega_{pe} = \sqrt{\frac{n_e e^2}{m_e \epsilon_0}} \quad (22)$$

Le théorème de Nyquist-Shannon [122] stipule que pour éviter le crénelage numérique, la fréquence d'échantillonnage doit être au moins le double de la fréquence du phénomène périodique résolu. Cette condition implique que le pas de temps Δt maximal adéquat pour simuler une décharge doit respecter la relation suivante :

$$\frac{1}{\Delta t} < \frac{\omega_{pe}}{2\pi} \rightarrow \Delta t < 2\pi\omega_{pe}^{-1}. \quad (23)$$

Puisque dans certaines régions de la décharge la densité électronique peut varier rapidement, on utilise habituellement un pas de temps $\Delta t < 0.1 \omega_{pe}^{-1}$ par souci de stabilité de l'algorithme afin que les principes de conservation soient toujours satisfaits [121].

2.1.2 Équations du champ électrique

Le calcul du champ électrique à proximité de la surface est essentiel pour la description adéquate de la trajectoire des particules chargées. En particulier, la déviation des ions par le champ électrique lors de leur transport dans les tranchées est un phénomène ayant des effets importants sur la topographie finale du profil. Ce champ électrique est produit par l'accumulation de charge sur la photo-résine, ce qui déforme localement le champ électrique de la gaine ionique. Dans l'approximation du plasma électrostatique bidimensionnel, le champ électrique est complètement déterminé par l'équation de Poisson :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = -\frac{\rho(x, y)}{\epsilon_0} \quad (24)$$

où φ est le potentiel électrique, ρ la densité de charge locale. Le champ électrique E est relié au potentiel par la relation suivante :

$$\vec{E} = -\Delta\varphi . \quad (25)$$

Pour résoudre l'équation de Poisson, nous exploiterons le fait que le domaine de simulation est discrétisé pour utiliser une méthode de résolution d'équation différentielle numérique. Pour ce faire, nous devons calculer la densité de charge en tous points de grille du domaine de simulation.

2.1.2.1 Modèle des particules de taille finie

Puisque les particules occupent des positions continues dans l'espace, il est nécessaire d'effectuer une interpolation pour attribuer la charge aux points fixés par la grille. Un modèle particulaire de taille finie est utilisé pour effectuer cette interpolation. De cette façon, on diminue grandement les erreurs introduites par une méthode plus simple telle la méthode du point le plus rapproché.

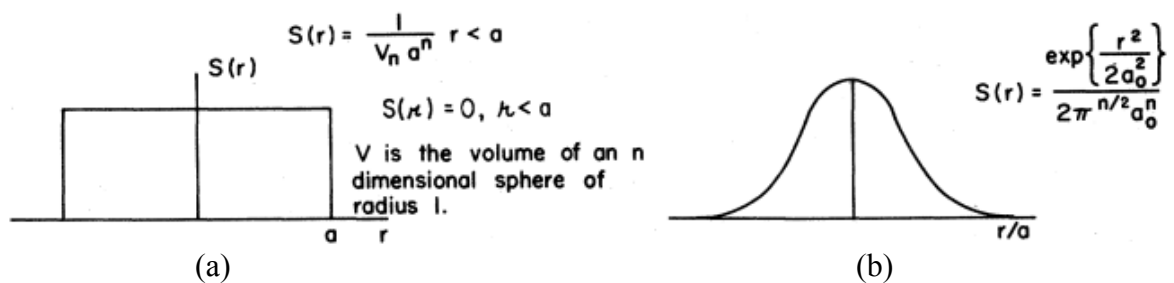


Figure 25. a) Facteur de forme carrée qui représente un cercle uniformément chargé. b) Facteur de forme gaussien qui représente un cercle dont la composante radiale de la charge suit une loi normale.

On définit le facteur de forme à symétrie sphérique $S(r)$ qui représente une fonction de distribution de la charge autour de la particule. La figure 25 présente les facteurs de

formes typiquement utilisés dans les simulations particulières des plasmas. Le calcul de la contribution des charges à la densité en un point de grille (j, k) est effectué en intégrant le facteur de forme sur la région occupée par la charge qui est attribuée à ce point à partir des charges de toutes les particules contribuant à ce nœud (point de grille) :

$$\rho_{j,k} = \sum_n \iint_{j\Delta x - \frac{\Delta x}{2}, k\Delta x - \frac{\Delta x}{2}}^{j\Delta x + \frac{\Delta x}{2}, k\Delta x + \frac{\Delta x}{2}} q_n S_n(x, y) dx dy . \quad (26)$$

Cette étape d'interpolation calcule la densité de charge en tout point de la grille, ce qui est essentiel pour résoudre l'équation de Poisson afin d'obtenir le champ électrique (fig. 26).

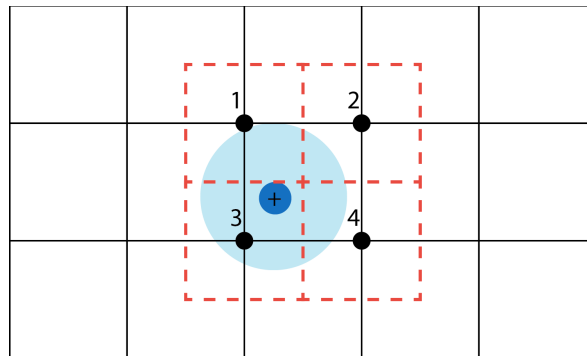


Figure 26. Schéma de l'algorithme d'interpolation de la densité de charge. La charges aux nœuds (1,2,3,4) est calculée en intégrant la densité de charge présente dans chaque cellules.

2.1.2.2 Résolution de l'équation de Poisson

Il existe deux méthodes principalement utilisées pour la résolution de l'équation de Poisson, soit la méthode spectrale par transformée de Fourier rapide [123], [124], [125], soit la méthode des différences finies [126], [127]. La méthode spectrale est utilisée lorsque le domaine de simulation est de forme rectangulaire, mais s'adapte difficilement

aux géométries complexes. La résolution par différences finies est alors généralement privilégiée puisque c'est une méthode relativement simple à implémenter, même dans le cas de géométries complexes. L'équation de Poisson dans sa version discrétisée par une différence finie centrale est donnée par :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\varphi(x, y) \cong \frac{1}{\Delta x \Delta y} (\varphi_{j+1,k} + \varphi_{j-1,k} + \varphi_{j,k+1} + \varphi_{j,k-1} - 4\varphi_{j,k}) = -\rho_{j,k} . \quad (27)$$

L'expression du potentiel sera déterminée à l'aide d'une méthode numérique de résolution d'équations différentielles. Des algorithmes itératifs par relaxation telles que les méthodes de Jacobi [128] ou de Gauss-Seidel sont habituellement utilisées pour résoudre le système. Chacun de ces algorithmes nécessite une approximation initiale du potentiel. Cette approximation initiale, ainsi que la précision demandée, sont les facteurs déterminants quant à la vitesse de convergence des différents algorithmes.

On obtient finalement l'expression du champ électrique présent dans les cellules en écrivant la forme discrète de l'équation 25 à l'aide d'une différence centrale :

$$\vec{E}_{l,m} = \frac{\varphi_{l+1/2,m} - \varphi_{l-1/2,m}}{\Delta x} \vec{i} + \frac{\varphi_{l,m+1/2} - \varphi_{l,m-1/2}}{\Delta y} \vec{j} . \quad (28)$$

Le champ électrique ainsi calculé est le champ moyen agissant sur l'ensemble de la cellule. On obtient finalement la force appliquée sur une particule en effectuant une interpolation similaire à celle effectuée lors de l'assignation des densités de charges :

$$\vec{F}_n = \iint E(x, y) q_n S_n(x, y) dx dy . \quad (29)$$

On peut finalement faire avancer la particule en utilisant cette force dans « le pousseur de particules » et ainsi simuler la trajectoire individuelle de chaque particule. On rappelle que la section précédente présente la résolution pour un système dans la limite électrostatique. Pour le cas pleinement électromagnétique, le principe général reste le même (fig. 27). Cependant, en plus d'assigner les charges aux points de la grille de simulation, les densités de courant doivent également y être calculées. De plus, pour déterminer le champ, l'équation de Laplace n'étant pas suffisante, les équations de Maxwell, ou un sous-ensemble de celles-ci devront être résolues numériquement. La conception de ce type d'algorithme de résolution est très complexe. C'est pourquoi on retrouve peu de bibliothèques informatiques gratuites ou en source ouverte. Les groupes de recherches doivent développer des codes maison [129-131] ce qui est un processus à long terme ou bien faire l'acquisition de logiciels commerciaux [132-135] qui sont souvent beaucoup plus rapides en plus de garantir une marge d'erreur plus faible [136].

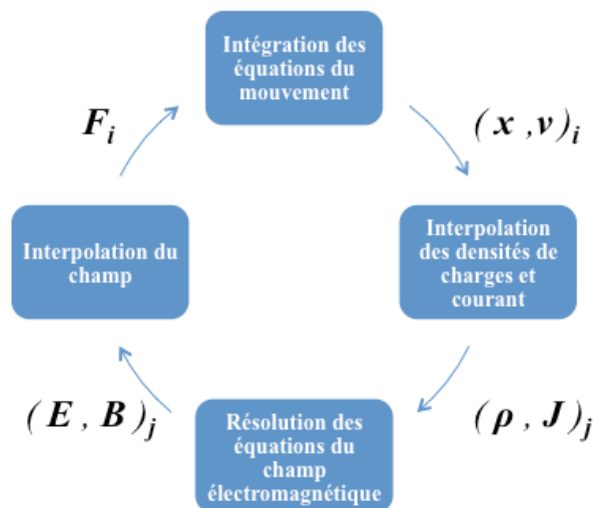


Figure 27. Diagramme du cycle élémentaire de calcul de la méthode particle-in-cell dans le cas d'un champ électromagnétique.

2.2 Méthode Monte Carlo

Le terme méthode Monte-Carlo s'applique à toute technique de résolution de problème par l'entremise de nombres aléatoires. Cette méthode stochastique est très utilisée en physique statistique et dans les systèmes dynamiques où les propriétés des particules ainsi que leurs interactions peuvent être représentées par des fonctions de densité de probabilité. Ce type de simulation, contrairement aux simulations de type dynamique moléculaire, permet d'omettre le détail de chaque évènement tout en maintenant un comportement collectif respectant la physique en jeu. Ce comportement collectif assure que les données extraites des simulations, sous forme de densités de probabilité des différents paramètres observés, sont équivalentes à celles obtenues par le calcul détaillé de chaque évènement.

2.2.1 Génération de nombre aléatoire

Un générateur de nombre aléatoire permet d'obtenir une séquence équiprobable de nombres sur un intervalle quelconque $[A, B]$. La fonction de densité de probabilité d'une telle séquence est donnée par :

$$P(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & \text{pour } a < x < b \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} . \quad (30)$$

Comme toute fonction de densité de probabilité, la condition de normalisation est respectée :

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(x)dx = 1 \quad . \quad (31)$$

Plusieurs algorithmes [137] permettent d'obtenir une séquence de nombre pseudo-aléatoires à partir d'une valeur de départ appelée graine aléatoire. Le terme pseudo-aléatoire est utilisé lorsque la génération de nombre est effectuée à partir d'un algorithme déterministe, comme c'est le cas pour toute routine informatique. On mesure la performance de ces générateurs en observant la convergence plus ou moins rapide de la séquence vers la fonction de densité uniforme ainsi que le temps d'exécution moyen nécessaire pour tirer un nombre aléatoire. Dans le simulateur, nous avons implémenté le générateur ran2, proposé par la référence « Numerical Recipes in C »[138], puisqu'il s'agit d'un générateur ayant démontré ses qualités et qui est couramment utilisé dans les simulations physiques.

2.2.2 Échantillonnage des fonctions de distributions

La densité de probabilité uniforme donnée par le générateur est directement utilisée pour modéliser des phénomènes équiprobables, tels que la distribution angulaire d'espèces à l'équilibre thermodynamique ou bien la coordonnée d'entrée dans le domaine de simulation provenant d'un flux uniforme de particules. En général, on veut pouvoir générer une séquence de nombres pseudo-aléatoires qui est distribuée selon une fonction de densité de probabilité quelconque.

2.2.2.1 Méthode de la transformée inverse

Il est possible d'obtenir une expression pour générer une variable x aléatoire provenant d'une fonction de densité de probabilité en exploitant les propriétés de la fonction de répartition. On définit la fonction de répartition $F(x)$ comme suit :

$$F(x) = \int_{-\infty}^x P(x') dx' . \quad (32)$$

La fonction de répartition représente la probabilité cumulative jusqu'à un certain x . La normalisation de $P(x)$ implique que la fonction de répartition est restreinte à l'intervalle $[0,1]$. Si u est une variable aléatoire équiprobable sur l'intervalle $[0,1]$, alors on obtient x , une variable aléatoire distribuée selon la densité de probabilité P , par inversion de $F(x)$:

$$x = F^{-1}(u) . \quad (33)$$

Cette méthode repose sur la possibilité de déterminer la primitive de P ainsi que l'inverse de la fonction de répartition. Deux cas habituels sont maintenant présentés ci-dessous.

2.2.2.1.1 Loi exponentielle

La loi exponentielle est centrale aux fonctions de densité de probabilité des processus chimiques de surface, telles que la diffusion de surface et la désorption. La probabilité de

transition en fonction du temps lors de ce type d'évènements est donnée par la relation suivante :

$$P(t) = e^{-t/\tau} \quad (34)$$

où τ représente le temps moyen d'attente avant le prochain évènement. Par la méthode d'inversion, on obtient la variable aléatoire t distribuée selon la loi exponentielle :

$$t = -\tau \ln(u) \quad (35)$$

2.2.2.1.2 Loi normale

La loi normale intervient couramment dans l'ajustement de fonctions de distributions, par exemple elle est utilisée pour décrire la fonction de distribution angulaire des ions lors de leur impact sur une surface polarisée. Définissons u_1 et u_2 , deux variables aléatoires uniformément distribuées sur l'intervalle $[0,1]$. Alors, on obtient [139] :

$$\theta_1 = \sqrt{-2\ln u_2} \sin 2\pi u_1 \quad \text{et} \quad \theta_2 = \sqrt{-2\ln u_2} \cos 2\pi u_1 \quad (36)$$

où θ_1 et θ_2 sont deux variables indépendantes distribuées selon une loi normale de moyenne nulle et d'écart type unitaire. Pour obtenir une distribution θ' selon une loi normale de moyenne a et d'écart type b , on effectue la transformation suivante :

$$\theta' = a + b\theta \quad . \quad (37)$$

2.2.2.2 Méthode de rejet de Von Neumann

S'il est impossible ou trop complexe de déterminer la transformée inverse (éq. 33), il est préférable de se rabattre sur une méthode numérique comme la méthode de rejet de Von Neumann [140]. Pour imaginer la méthode, il s'agit de lancer une fléchette aléatoirement à l'intérieur d'une région bornant la fonction de densité de probabilité $P(x)$. (fig. 28). Si la fléchette tombe au-dessus de la courbe limitant la région, on rejette la valeur alors que si elle tombe à l'intérieur de la courbe, on la garde. La séquence de nombres aléatoires x générée est ainsi distribuée selon la densité de probabilité $P(x)$. Dans un langage plus rigoureux, on effectue l'algorithme de la façon suivante :

- Déterminer le maximum M de la distribution
- Générer un nombre aléatoire x sur l'intervalle borné par $P(x)$
- Générer un nombre aléatoire y sur l'intervalle $[0, M]$
- Si $y > P(x)$ rejeter la valeur de x et recommencer, si $y < P(x)$ accepter y
- y est une variable aléatoire distribuée selon $P(x)$

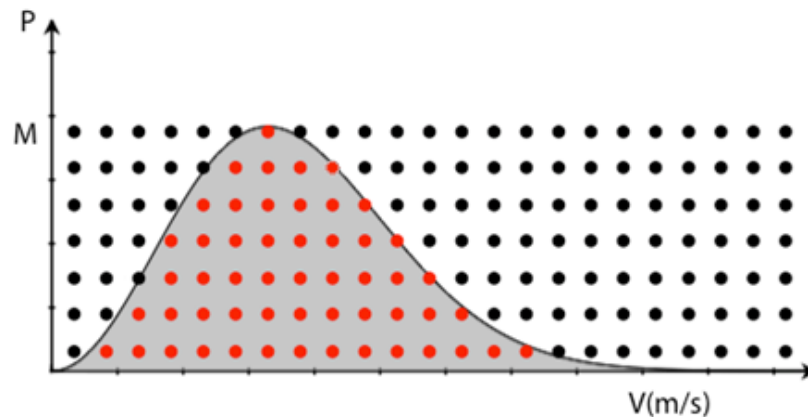


Figure 28. Schéma de l'algorithme de rejet de Von Neumann

2.2.3 Méthode de Monte-Carlo cinétique

La méthode de Monte-Carlo cinétique permet de simuler des processus stochastiques dont l'ensemble des transitions ainsi que leur probabilité respective sont connus et dénombrables. Cette méthode est couramment utilisée pour la modélisation des procédés de surface à barrière d'activation, tels que la diffusion de surface et la désorption. Contrairement aux simulations de dynamique moléculaire, on décrit l'évolution du système par la transition entre différents états. Cette méthode implique qu'il faut connaître préalablement chacune des transitions possibles ainsi que leur probabilité respective. Par contre, si ces conditions sont remplies, la méthode cinétique permet d'effectuer des simulations atomistiques sur des échelles de temps similaires au temps des processus de croissance de couche mince, ce qui ne peut être réalisé par la dynamique moléculaire. Cela en fait une méthode bien adaptée pour des simulations sur de longues échelles de temps. Les taux de réactions k des processus suivent l'équation d'Arrhenius :

$$k = k_0 e^{-E_b/k_B T} \quad (38)$$

où k_0 est le facteur pré-exponentiel qui représente la fréquence d'essai et où le terme exponentiel est une probabilité de réussite par essai. En supposant que la probabilité de transition soit indépendante de l'histoire du système et uniforme dans le temps, alors le système peut être décrit par un processus de Poisson. Dans ce cas, la fonction de densité de probabilité $p(t)$ d'un événement est donnée par :

$$p(t) = k e^{-kt} . \quad (39)$$

Pour un ensemble de N réactions individuellement décrites par un processus de Poisson, le système se réduit à un unique processus de Poisson où la densité de probabilité est :

$$P(t) = Ke^{-Kt} \quad (40)$$

avec

$$K = \sum_{i=1}^N k_i . \quad (41)$$

La fonction $P(t)$ donne directement la probabilité de transition pour le système complet. La fonction de partition s'obtient directement par :

$$F(t) = e^{-Kt} . \quad (42)$$

On a vu précédemment comment produire une séquence aléatoire distribuée selon une loi exponentielle et c'est l'utilisation de cette technique qui définit la méthode Monte-Carlo cinétique. La variable aléatoire du temps t avant le prochain évènement est donnée par (section 2.2.2.1) :

$$t = -\frac{\ln(u)}{K} . \quad (43)$$

La séquence de nombres t décrit le temps de transitions pour l'ensemble du système, mais ce faisant, on ne peut identifier l'évènement en particulier ayant produit la transition. Dans la méthode de Monte-Carlo cinétique, on détermine cet évènement en générant une séquence aléatoire d'évènements distribués selon la densité de probabilité relative des N transitions possibles. Pour ce faire, on construit la fonction de partition suivante,

$$F_i = \sum_{j=1}^i k_j . \quad (44)$$

En utilisant l'équation (41), on détermine l'évènement i par résolution de l'inégalité suivante,

$$F_{i-1} < uK < F_i . \quad (45)$$

Cette méthode d'échantillonnage de la fonction de densité de probabilité est la version numérique de la méthode par transformée inverse. L'information sur t et i permet de mettre à jour et ainsi simuler le système à partir de l'algorithme de Monte-Carlo cinétique, soit

0. initialiser le temps, $t = 0$
1. Construire une liste des taux de transitions k_i des N transitions possibles
2. Construire la fonction de partition $F_i = \sum_{j=1}^i k_j$ et attribuer $K = F_N$
3. Générer un nombre aléatoire $u \in [0,1]$
4. Sélectionner l'évènement en résolvant pour i , $F_{i-1} < uK < F_i$
5. Effectuer la transition i
6. Mettre à jour les taux de transitions k_i affectés par la transition
7. Générer un nombre aléatoire $u \in [0,1]$
8. Mettre à jour le temps, $t = t + \Delta t$, où $\Delta t = -\frac{\ln(u)}{K}$
9. Aller à l'étape 1

On remarque une propriété remarquable de la méthode cinétique : la simulation n'est mise à jour que si un évènement se produit. Le pas de temps entre chaque transition n'est pas fixe, comme c'est le cas pour l'intégration de l'équation du mouvement des particules.

C'est pourquoi lors de la conception du simulateur, il faudra établir un système pour gérer l'exécution des différents types d'évènements à des pas de temps distincts.

CHAPITRE 3.

PRÉSENTATION DU SIMULATEUR DE PROFIL CELLULAIRE

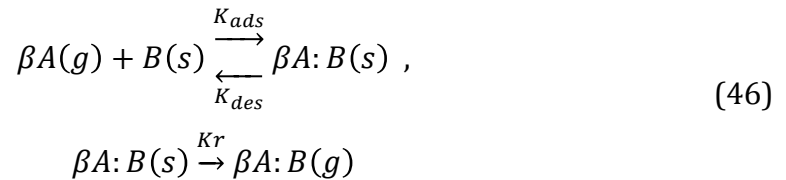
Puisque le simulateur développé par nos soins doit décrire l'évolution de la topographie de la surface, le domaine de simulation considéré se limite à la surface du motif. Ceci implique que les informations relatives aux fonctions de distribution à l'entrée du domaine doivent être connues préalablement. La plupart de ces informations peuvent être approximées par la théorie des plasmas ou être tirées de données expérimentales. Les informations manquantes seront considérées comme des paramètres libres qui seront déterminés par comparaison entre les profils simulés et les profils expérimentaux. Les profils des motifs simulés étant petits devant le libre parcours moyen, on considère que les particules n'effectuent pas de collisions dans le domaine de simulation. Le mouvement des particules dans les cases vides, représentant la phase gazeuse, est décrit par la méthode PIC, alors que le matériau est simulé par un modèle cellulaire. Les méthodes de Monte-Carlo décrites précédemment seront exploitées pour la génération de variables aléatoires afin de décrire les phénomènes stochastiques.

3.1 Transport des particules

Le calcul de la trajectoire individuelle des différentes espèces est essentiel pour rendre compte de la distribution du flux sur la surface à traiter. Puisque la trajectoire des particules neutres n'est pas affectée par le champ électrique, contrairement aux particules ioniques, on sépare la présentation du calcul du transport de ces espèces en deux sections.

3.1.1 Particules neutres

Considérons l'ensemble de réactions suivantes, qui décrit l'adsorption d'un nombre β de radicaux A de la phase gazeuse sur la surface B , suivie de la désorption du produit de gravure $\beta A : B$ vers la phase gazeuse :



où K_{ads} , K_{des} sont les taux de réaction d'adsorption et désorption de l'espèce A sur la surface B , et K_r le taux de réaction de la désorption du produit volatil $\beta A : B$. Cet ensemble de réactions représente les cas les plus communs de gravure réactive. On peut citer comme exemple la gravure du silicium par un gaz fluoré dans lequel l'adsorption de 4 atomes de fluor sur la surface mène à la gravure par désorption spontanée du produit SiF_4 . Si les taux de réactions sont connus, à l'état stationnaire, le taux de création de l'espèce $\beta A : B$ dépend uniquement du flux incident des radicaux A . Attardons-nous alors un instant sur une méthode efficace du calcul du flux d'espèces neutres réactives sur la surface.

Le transport des espèces neutres réactives vers la surface est grandement influencé par la géométrie initiale du système ainsi que par la formation de microstructures lors du procédé. Le phénomène d'ombrage des neutres [141], [142], créé par les motifs, implique une non-uniformité du flux qui, en fonction des conditions opératoires, peut influencer grandement l'évolution du profil lors de la gravure. Dans les plasmas à basse pression et haute densité, le libre parcours moyen est très grand par rapport aux dimensions du domaine de gravure. On considère donc un régime d'écoulement moléculaire, ce qui implique que seuls les interactions particules-surfaces sont à considérer. Puisque les particules neutres ne sont pas affectées par le champ électrique, on considère qu'elles

possèdent une distribution en énergie maxwellienne. En supposant également que la vitesse de dérive engendrée par le flux de gaz est négligeable devant la vitesse du mouvement brownien dû à leur énergie thermique, alors la distribution angulaire à l'entrée du domaine de simulation est isotrope. Dans ce cas, le flux par unité de surface de neutre d'une espèce i en phase vapeur est donné par la relation suivante :

$$\Gamma_i = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{8kT_i}{\pi m_i}} n_i . \quad (47)$$

On introduit maintenant le coefficient de collage s qui représente la probabilité d'adsorption d'une espèce réactive lors d'une interaction avec la surface selon la définition :

$$s = \frac{\Gamma_{i_ads}}{\Gamma_i} \quad (48)$$

où Γ_{i_ads} est le flux net adsorbé de l'espèce i par unité de surface. Le coefficient de collage est habituellement une fonction de la température de l'espèce gazeuse et de la surface ainsi que du degré de recouvrement θ de la surface. En considérant l'équilibre thermodynamique entre la surface et le gaz à la température T , à partir de la cinétique de Langmuir, on obtient la relation suivante pour une adsorption non dissociative [80] :

$$s(\theta, T) = s_0(T)(1 - \theta) \quad (49)$$

où s_0 est le coefficient de collage sur la surface propre. Initialement, pour atteindre la surface, les espèces neutres proviennent directement de la phase vapeur en s'infiltrant dans la tranchée.

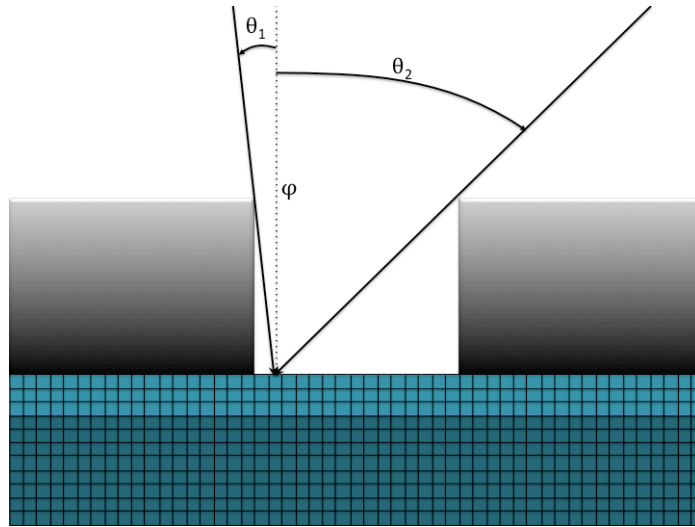


Figure 29. Schéma du calcul du flux direct de neutres provenant de la phase vapeur

On obtient le flux direct Γ_d en considérant une source isotrope à l'interface du domaine et en intégrant sur l'angle solide permettant une trajectoire rectiligne entre le plasma et la coordonnée de surface considérée (fig. 29), c'est-à-dire :

$$\Gamma_d = \frac{\Gamma_i}{2} \int_{\theta_1}^{\theta_2} \cos(\theta - \varphi) d\theta . \quad (50)$$

La figure 29 présente le schéma permettant d'obtenir les angles d'ouverture θ_1 , θ_2 de part et d'autre de la normale φ . Cette relation permet de rendre compte de l'effet d'ombrage des neutres provenant de la phase vapeur et donne une bonne évaluation du flux lorsque le coefficient de collage est près de l'unité. Par contre, plus le coefficient de collage diminue, plus cette expression sous-estime le nombre total de sites visités par particules incidentes. Lorsqu'une particule neutre thermique interagit avec la surface et qu'elle n'est pas adsorbée à la surface, elle subit une réflexion diffuse qui est bien représentée par une fonction de distribution angulaire en cosinus selon l'équation suivante [142] :

$$P(\varphi) = \frac{\cos(\varphi) d\varphi}{2}. \quad (51)$$

En fonction de leur direction de réémission, les particules peuvent ensuite sortir du domaine ou interagir à nouveau avec un élément de surface [143]. Chacune des cellules de surfaces devient une source secondaire de radicaux (fig. 30). Ainsi, pour obtenir le flux secondaire émis d'une cellule, on intègre la fonction de distribution sur l'angle sous-tendu par la cellule. On calcule le flux total en sommant sur toutes les cellules en vue direct :

$$\Gamma_r = \Gamma_a(1 - s) \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \frac{\cos(\theta) d\theta}{2}. \quad (52)$$

Ce flux secondaire de radicaux réactifs Γ_r alimente en partie les surfaces ombragées ce qui a pour effet d'homogénéiser la distribution du flux. Bien qu'initialement, le flux de radicaux soit relativement constant en tout point de la surface, le changement de géométrie et la formation de microstructures lors du procédé peuvent entraîner un ombrage important de certains éléments de surface.

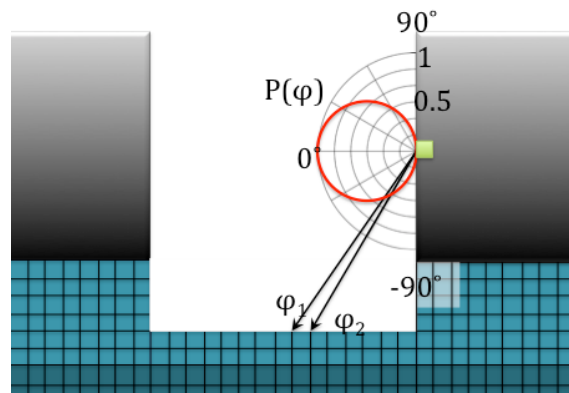


Figure 30. Schéma du calcul du flux secondaire Γ_r de particules neutres provenant de la réémission des parois.

3.1.2 Particules ioniques

Puisque dans la gaine les espèces ioniques acquièrent de l'énergie sous l'effet du champ électrique, ceci implique que les ions acquièrent une vitesse de dérive dirigée vers le substrat. L'injection des espèces ioniques est effectuée selon leur distribution en énergie et angulaire et leur flux respectif à l'interface du domaine de simulation. En l'absence de données expérimentales, on utilise un modèle de gaine statique, celui-ci donnant une bonne approximation initiale de ces distributions.

3.1.2.1 Gaine ionique

On présente dans cette section, sans entrer dans les détails du développement, les équations permettant d'extraire les informations sur les distributions des espèces ioniques à partir du modèle de gaine statique. Pour une description plus détaillée, on se référera au chapitre 6 de « Principles of plasma discharges and materials processing » de Lieberman et Lichtenberg [80]. En présence d'un substrat polarisé au potentiel V_s négatif par rapport au potentiel plasma V_p , on a création d'une gaine, c'est-à-dire d'une région dans laquelle la neutralité macroscopique est perdue, ce qui engendre la création d'un champ électrique dirigé vers le substrat. Cette gaine est une réponse naturelle du plasma qui distribue la charge pour répondre à la condition aux frontières du potentiel imposé sur le substrat. Le champ électrique accélère les ions dans la gaine et, en absence de collision, l'énergie gagnée par les ions est égale à la différence de potentiel entre la surface et le plasma. Cette hypothèse est valide au premier ordre puisqu'elle considère une gaine statique et néglige l'oscillation des ions à la fréquence ionique du plasma, mais les valeurs obtenues sont tout de même assez justes pour être utilisées comme information de départ pour la simulation.

Considérons un plasma à trois espèces, soit un gaz neutre engendrant une espèce simplement ionisée ainsi qu'une population électronique, chacune étant décrite par une distribution en énergie maxwellienne. On note en particulier la température électronique T_e et la température ionique T_i . De plus, faisons l'hypothèse du plasma froid, ce qui implique que la température $T_i \rightarrow 0$. En résolvant l'équation de conservation de l'énergie pour une chute de potentiel égale au potentiel plasma, V_p , on obtient l'inégalité suivante pour la vitesse ionique u_s à l'entrée de la gaine :

$$u_s \geq u_B = \sqrt{\frac{eT_e}{m_i}} \quad (53)$$

où m_i est la masse de l'espèce ionique. Cette inégalité, connue sous le nom de critère de Bohm, impose une vitesse minimale u_B , acquise dans la région de pré-gaine, nécessaire pour permettre aux ions de pénétrer dans la gaine. La pré-gaine est une région macroscopiquement neutre où les densités ioniques et électroniques chutent au même rythme. D'une part, la densité électronique chute par la répulsion due au champ électrique et d'autre part la densité ionique chute à cause de son accélération. Puisque l'hypothèse de gaine non collisionnelle n'implique aucune création d'espèces dans la gaine et pré-gaine, on obtient directement à partir de la distribution en énergie des électrons les densités ioniques et électroniques n_s à l'entrée de la gaine :

$$n_s = n_i (= n_e) e^{-\frac{V_p}{T_e}} \approx n_e e^{-\frac{1}{2}} . \quad (54)$$

En appliquant le même raisonnement, mais en utilisant cette fois-ci l'équation de conservation des ions à travers la gaine, on obtient finalement le flux d'ions frappant la surface polarisée :

$$\Gamma_{i0} = n_s u_B \approx n_e \sqrt{\frac{eT_e}{m_i}} e^{-1/2} . \quad (55)$$

À partir d'une simple mesure de la densité électronique (fig. 31) et de la température électronique, on obtient à partir de l'équation 55 le flux total des espèces ioniques par unité de surface.

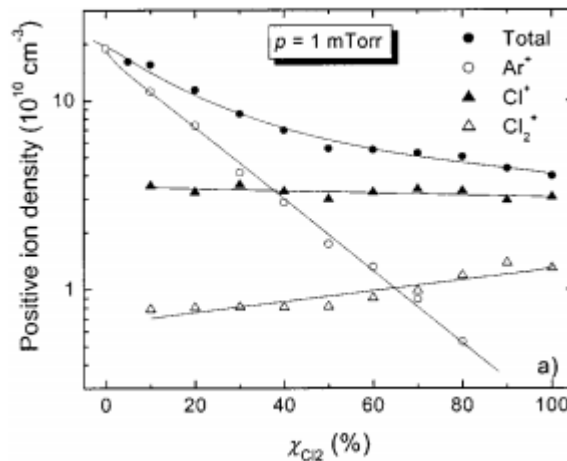


Figure 31. Densité ionique des différentes espèces dans un plasma de Ar/Cl₂ [144].

3.1.2.2 Fonction de distribution angulaire des ions (FDAI)

Dans les procédés de gravure dans une source de plasma à couplage inductif, les tensions de polarisation utilisées varient habituellement entre 100 et 500 eV. Cette énergie est très grande devant la température ionique qui ne dépasse pas les quelques dixièmes d'eV. Malgré cela, dans la limite non collisionnelle, cette température non nulle est directement responsable de la distribution angulaire des ions à la surface. En effet, bien que le champ électrique de la gaine accélère les ions vers la surface, l'agitation thermique parallèle de

ceux-ci par rapport à la surface n'est pas affectée par la gaine. Ainsi, les ions atteignant la surface ont une distribution en vitesse non nulle dans ce plan (fig. 32).

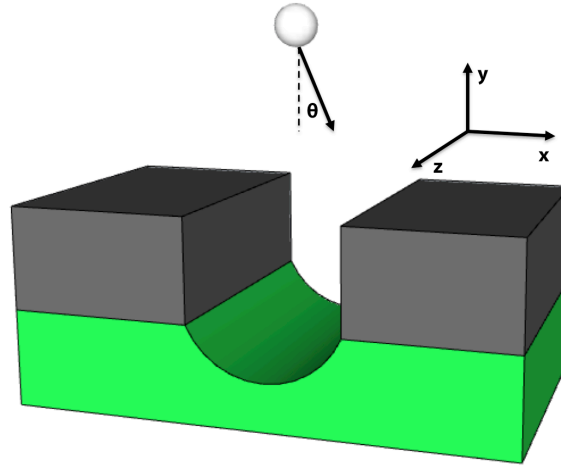


Figure 32. Vue schématisée en trois dimensions d'une tranchée gravée par un bombardement ionique.

Gardons les mêmes hypothèses qu'à la section précédente; en particulier rappelons-nous la distribution en vitesse maxwellienne des ions, ce qui implique une distribution angulaire isotrope des particules à l'entrée de la gaine. Dans ces conditions, on peut approximer la fonction de distribution en vitesse des ions à l'entrée de la gaine par la relation suivante [142] :

$$f(v_0) = n_s \left(\frac{m_i}{2\pi k_B T_i} \right) e^{-\frac{m_i(v_{x0} + v_{y0})}{2k_B T_i}} \quad (56)$$

où $v_0 = (v_{x0}, v_{y0})$ est la vitesse initiale à l'entrée de la gaine. Puisque tous les ions proviennent de la décharge au-dessus du substrat, on a comme condition que $v_{y0} < 0$ alors que v_{x0} peut prendre n'importe quelle valeur. Puisqu'on s'intéresse au profil à deux dimensions, l'équation (56) est déjà intégrée sur la coordonnée z . Après leur entrée dans la

gaine, les ions subissent une accélération dans la direction $-y$ jusqu'au moment de frapper la surface du substrat. On suppose, rappelons-le, une tension de polarisation V_s statique très grande devant la température ionique ($V_s \gg T_i$). Dans ce cas, l'effet de la gaine sur la distribution n'est que d'ajouter un terme de dérive dirigé vers la surface polarisée. Ainsi, la distribution se trouve décrite par :

$$f(v) = n_s \left(\frac{m_i}{2\pi k_B T_i} \right) e^{\frac{eV_s}{k_B T_i}} e^{-\frac{m_i(v_{x0} + v_{y0})}{2k_B T_i}} \quad (57)$$

où $v = (v_x, v_y)$ est la vitesse ionique à la surface. Puisque les ions ont acquis une énergie égale à eV_s dans la gaine, la nouvelle condition frontière pour la vitesse à la surface est $v_y < -\sqrt{2eV_s/m_i}$. Le flux total sur la surface est obtenu par l'intégrale suivante :

$$\Gamma_i = \int_{-\infty}^{-\sqrt{2eV_s/m_i}} \int_{-\infty}^{+\infty} v_y f(v) dv_x dv_y . \quad (58)$$

En observant que l'angle d'incidence des ions est donné par $\theta = -\arctan^{-1}(v_x, v_y)$, et en définissant le paramètre $R = \frac{eV_s}{k_B T_i}$ l'équation 58 peut être réécrite de la façon suivante [142] :

$$\Gamma_i = \Gamma_{i0} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} G(\theta) \cos(\theta) d\theta \quad (59)$$

où,

$$G(\theta) = \frac{e^R}{\sqrt{\pi}} \left(\sqrt{R} \sec \theta e^{-R \sec^2 \theta} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erfcf}(\sqrt{R} \sec \theta) \right). \quad (60)$$

L'expression $G(\theta) \cos(\theta)$ est appelée distribution angulaire du flux ionique et, dans ce modèle simple, cette distribution est totalement déterminée par le paramètre R . La figure 33 présente la forme de cette distribution pour diverses valeurs de R .

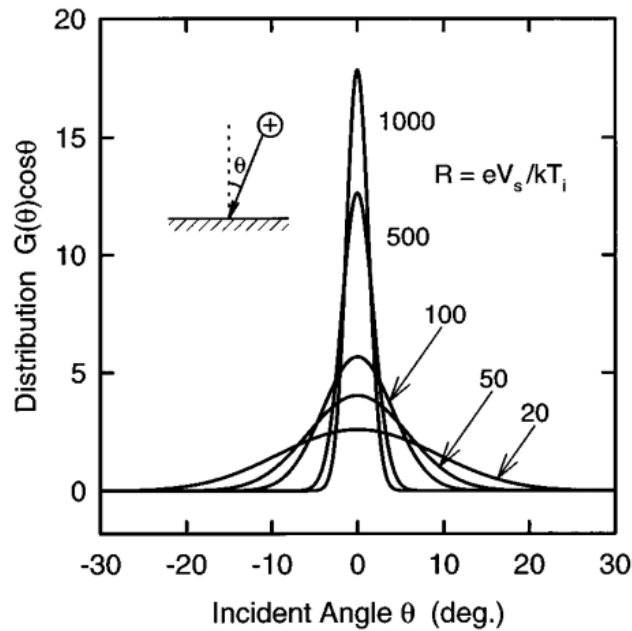


Figure 33. Distribution angulaire du flux à la surface en fonction du paramètre R [142].

On observe que plus la tension de polarisation est grande devant la température ionique, plus la distribution ionique est étroite. Dans les sources de plasma à couplage inductif, on opère typiquement avec des tensions de polarisation comprise entre 100eV à 500eV et les températures ioniques sont généralement $\lesssim 1$ eV. Ces conditions impliquent que, pour ce type de source, le paramètre $R = \frac{eV_s}{k_B T_i} \approx 100 - 500$. En se référant à la figure 33 on

s'aperçoit, que pour ces conditions, la distribution angulaire du flux apporte une contribution importante surtout pour des angles d'incidence $< 10^\circ$. Cette constatation permet d'effectuer une approximation des petits angles, où, dans cette limite $\sin \theta \approx \tan \theta \approx \theta$ et $\cos \theta \approx \sec \theta \approx 1$: l'équation (60) peut être simplifiée pour obtenir une expression analytique de la distribution angulaire du flux sous la forme

$$f(\theta)d\theta \sim e^{-R\theta^2} . \quad (61)$$

Cette expression représente une distribution normale dont la largeur à mi-hauteur (LMH) est reliée au paramètre R par la relation suivante :

$$LMH = 2.3548 \frac{1}{\sqrt{2R}} = 2.3548 \sqrt{\frac{k_B T_i}{eV_s}} . \quad (62)$$

La distribution gaussienne est couramment utilisée pour l'ajustement des distributions angulaires obtenues par les expérimentateurs [102, 103, 145], ce qui est justifié par le modèle présenté dans cette section.

3.1.2.3 Fonction de distribution en énergie des ions (FDEI)

Une information essentielle requise par le simulateur est la distribution en énergie des ions lors de leur impact avec le substrat. C'est cette énergie qui détermine le type d'interaction avec la surface. En particulier, cette information est essentielle pour le calcul du rendement de pulvérisation. Dans le modèle présenté ci-dessus, les hypothèses imposent

une distribution monomodale aux ions frappant la surface. En réalité, les distributions en énergies sont rarement aussi simples puisque l'interaction des ions avec la gaine est affectée par la fréquence fournie par le générateur et par celle appliquée au substrat polarisé ainsi que par la fréquence d'oscillation naturelle des ions dans la décharge. L'ajustement sera préférablement effectué à partir de données expérimentales (fig. 34). En absence d'informations expérimentales, la distribution en énergie monomodale est une bonne approximation dans le cas où la fréquence de polarisation appliquée au substrat est assez grande devant celle du générateur. Ceci est le cas pour le type de source utilisée dans nos laboratoires (fréquence du générateur 2 MHz, fréquence de la polarisation du substrat 13.56MHz) (fig. 34). Dans le cas contraire, on doit tenir compte de la nature oscillatoire de la gaine lors de la modélisation. La description détaillée du phénomène dépassant grandement la nature de ce document, on invite le lecteur à se référer aux travaux existant sur le sujet [146-149]. Ces ouvrages présentent des modèles de gaines résolus numériquement qui permettent de générer des statistiques sur les fonctions de distribution des particules. Éventuellement, ce genre de simulation pourrait être intégré au simulateur de profil sous forme d'un module exécuté en début de programme qui générerait les FDEI et la FDAI pour chacune des espèces chargées.

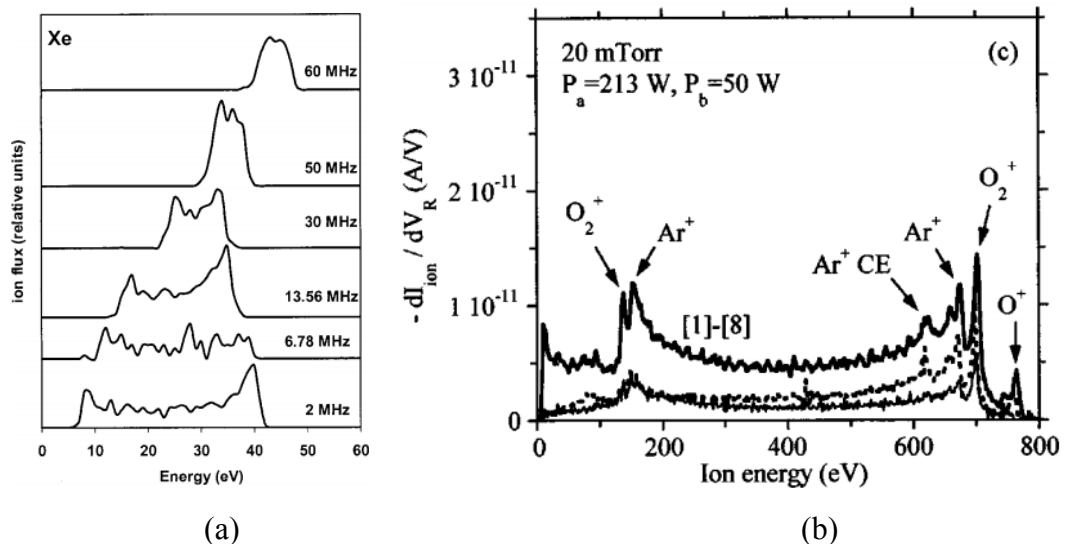


Figure 34. a) Distribution en énergie du Xe à la surface d'un substrat polarisé à diverses fréquences [150]. b) Distribution en énergie d'un plasma à diverses espèces [151].

3.2 Modélisation de la surface

Cette section est consacrée aux différents modèles décrivant l'évolution de la surface selon les différents mécanismes physiques impliqués. Dans un premier temps, on présente les concepts de base de la simulation de matériau par le modèle cellulaire. Ensuite, on présente les modèles de gravure et de dépôt utilisés pour décrire l'évolution de la surface.

3.2.1 Géométrie du profil

Dans la méthode cellulaire, les atomes liés aux matériaux occupent les carrées formées par la grille de discrétisation du domaine de simulation. Lorsqu'au moins une particule solide occupe une position dans la grille, l'état de la cellule passe de vide à solide. La cellule représente donc l'élément infinitésimal de matériau pouvant être ajouté ou retiré pour faire évoluer l'allure du profil. L'avantage au niveau calculatoire de la méthode cellulaire réside dans le choix d'une taille de cellule suffisante pour que celle-ci contienne un nombre important d'atomes. Pour décrire l'évolution du profil, il suffit de connaître les flux entrant et sortant de chaque cellule résultant de l'interaction avec les particules libres provenant de la phase gazeuse. Bien que la méthode ne rende pas compte de la structure fine du solide au niveau cristallin, la simulation cellulaire, ne nécessitant pas le calcul atomistique détaillé, permet de simuler des systèmes sur des échelles temporelles et dimensionnelles hors de la portée de la simulation par dynamique moléculaire. Le profil initial est construit selon la géométrie du système à simuler. Si la simulation est effectuée dans le but d'être comparée à des résultats expérimentaux, le profil initial est construit à partir d'une image obtenue par microscopie de la surface (fig 35).

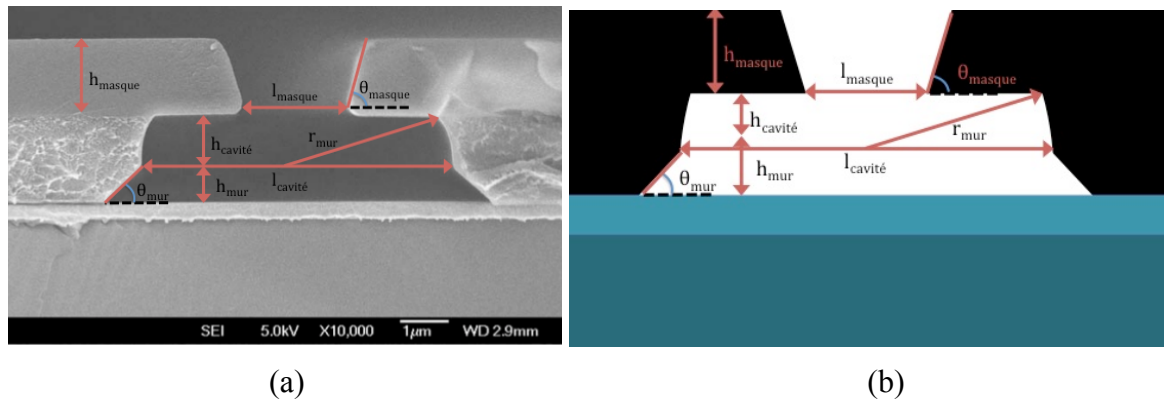


Figure 35. a) Profil expérimental obtenu par microscopie électronique à balayage. b) Profil numérisé.

Le profil numérisé pour le simulateur est la représentation schématique du profil où chaque matériau est identifié par une couleur différente. Lorsque le simulateur initialise le profil, il compare chacune des couleurs avec sa base de données interne qui définit la composition des cellules et les propriétés de celles-ci telle que la densité, la masse et le numéro atomique. Puisque les cellules de surfaces sont les seules impliquées dans les processus chimiques, celles-ci sont identifiées et stockées dans une liste dynamique. Cette façon de faire permet un accès plus rapide aux propriétés des cellules, ce qui accélère de façon substantielle le temps de calcul des processus de surface.

3.2.1.1 Modèle sous-cellulaire du calcul des collisions

Dans le modèle cellulaire traditionnel, lorsqu'au moins un atome de matériau est présent dans une cellule, l'état de la région délimitée par celle-ci est affecté. Cette façon de décrire le profil surévalue l'ombrage causé par la présence de quelques atomes occupant les sites voisins lors du transport des particules. Prenons l'exemple présenté à la figure 36. Les lignes pointillées représentent le contour de la cellule et le remplissage est proportionnel au nombre d'atomes présents à ce site. Dans le modèle cellulaire standard, le calcul des

collisions s'effectue aux contours délimités par la cellule. Nous proposons ici un calcul collisionnel sous-cellulaire. Lorsqu'un atome entre en collision avec une cellule, il suffit de vérifier le nombre d'atomes présents dans la cellule et d'ajuster la boîte de collision en conséquence (fig. 36). Le calcul des processus de surface ainsi que le rendu graphique s'effectue toujours par rapport à la grille ce qui permet de traiter le problème d'ombrage du modèle cellulaire standard sans allonger le temps d'exécution du simulateur.

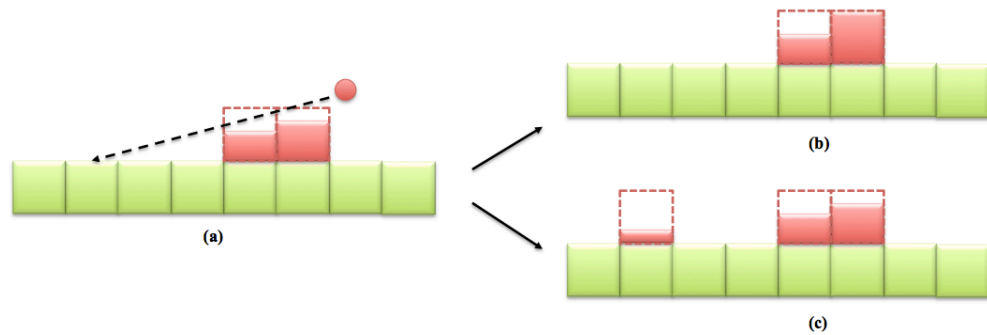


Figure 36. a) Comparaison de la cellule où s'effectue le dépôt entre le modèle traditionnel des collisions cellulaires b) et le modèle sous-cellulaire c).

3.2.2 Pulvérisation par bombardement ionique de basse énergie

Depuis la formulation originale par Sigmund [66], plusieurs modifications ad hoc [67, 152-155] furent apportées à son modèle pour rendre compte des comportements anisotropes introduits par les effets de seuil lors du bombardement ionique à basse énergie. La formulation utilisée pour le simulateur est celle récemment développée par Zhang et Zhang [69], dans laquelle la dépendance du rendement de pulvérisation sur l'énergie E_i et l'angle d'incidence θ_i est donnée par :

$$Y(E_i, \theta_i) = Y_p(E_i, \theta_i)B \left[1 - A \cos \theta_i \sqrt{\frac{E_z}{E_i}} \right] \quad (63)$$

où A et B sont des fonctions des paramètres du système ion-surface, dépendantes de M_i et de M_s , respectivement la masse des ions incidents et des atomes de la surface, de E_i et finalement U_s , l'énergie de sublimation des atomes de la surface. $Y_P(E_i, \theta_i)$ est l'expression classique du rendement de pulvérisation de Sigmund.

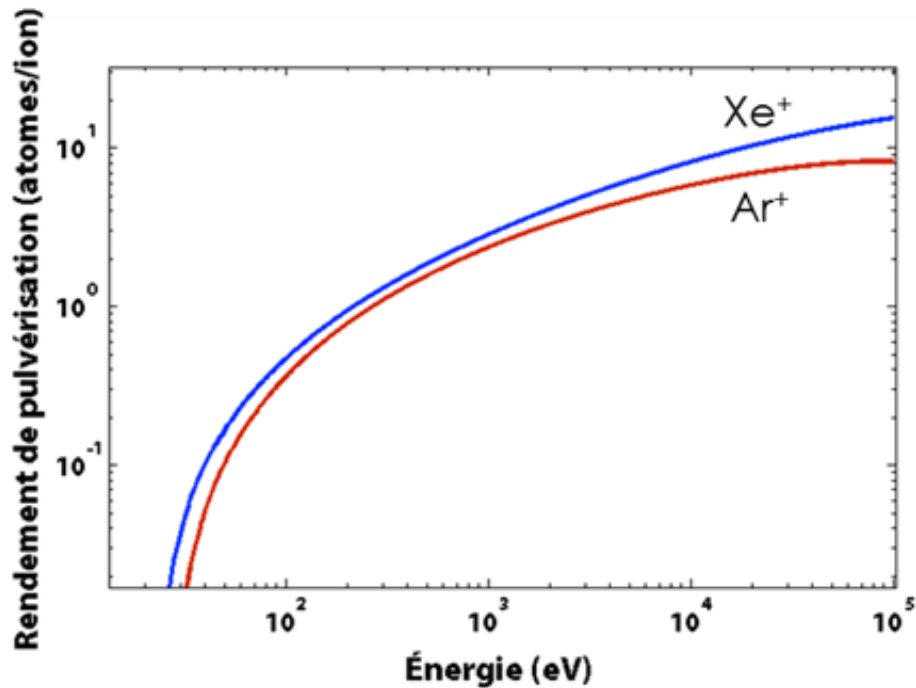


Figure 37. Dépendance énergétique du rendement de pulvérisation du Pt donnée par l'équation (63) ajustée sur les données présentées par Eckstein [64].

Notons que la dépendance angulaire de l'équation 63 n'est valide que pour des angles d'incidence $\theta_i \lesssim 70^\circ$ puisqu'elle ne modélise pas la probabilité de réflexion des ions rasant la surface. Le comportement angulaire doit donc être obtenu de données expérimentales ou par statistique extraite des simulations de pulvérisations telles que SRIM [156]. En général, les rendements de pulvérisation passent par un maximum pour des angles compris entre 40° et 60° , bien que dans le cas des métaux formés d'éléments lourds (Au, Pt, W) la dépendance angulaire soit décroissante de façon monotone (fig. 38).

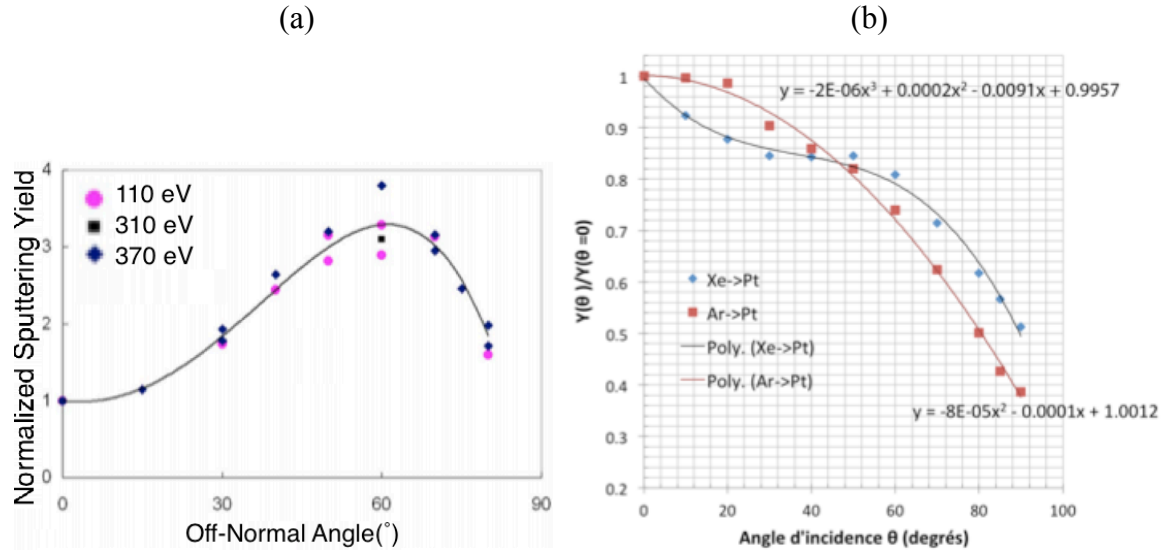


Figure 38. a) Dépendance angulaire expérimentale du rendement de pulvérisation du Si polycristallin sous l'effet du bombardement par Ar^+ [157]. Ajustement du rendement de pulvérisation relatif à partir de statistiques produites par SRIM.

3.2.2.1 Fonction de distribution des espèces pulvérisées

Lorsqu'on pulvérise la surface, les produits de gravure sont généralement non volatils et peuvent se redéposer sur les parois ou d'autres parties exposées du motif. Tenir compte de ce phénomène exige la connaissance des fonctions de distribution en énergie et en angle des particules pulvérisées. Les relations présentées dans cette section dérivent du modèle de rendement de pulvérisation de Zhang et Zhang présenté dans la section précédente.

3.2.2.1.1 Fonction de distribution en énergie des espèces pulvérisées

À basse énergie, la fonction de distribution en énergie f_{E_s} des particules pulvérisées perpendiculairement à la surface ($\varphi_s = 0$) se résume à [69] :

$$f_{E_s} = \frac{C E_s}{(E_s + U_s)^3} \left[1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E_z}{E_i}} \sqrt{\frac{E_s + U_s}{U_s}} \right] \quad (64)$$

où C est une constante de normalisation et E_z un paramètre empirique déterminé à partir de l'ajustement du rendement de pulvérisation sur les résultats expérimentaux. En traçant la fonction de distribution pour différentes énergies des ions incidents, on observe (fig. 39) que le pic de probabilité se retrouve dans tous les cas près de la valeur de l'énergie de sublimation du matériau et ne dépend que faiblement de l'énergie des ions incidents. L'influence de l'augmentation de l'énergie des ions se fait remarquer par l'importance de la queue de la fonction de distribution qui s'accroît avec l'énergie de bombardement. Cependant, même à 500 eV, seul une minorité d'atomes pulvérisés possède une énergie supérieure à 30eV. Puisque le seuil de pulvérisation d'Al par Ar est d'environ 30eV, cela revient à dire que dans ce système la repulvérisation de la surface par les atomes pulvérisés est négligeable devant la pulvérisation due au flux ionique. En étudiant les énergies de sublimation et les seuils de gravure de différents systèmes matériau/ion incident, on s'aperçoit que la conclusion demeure la même pour la majorité d'entre eux.

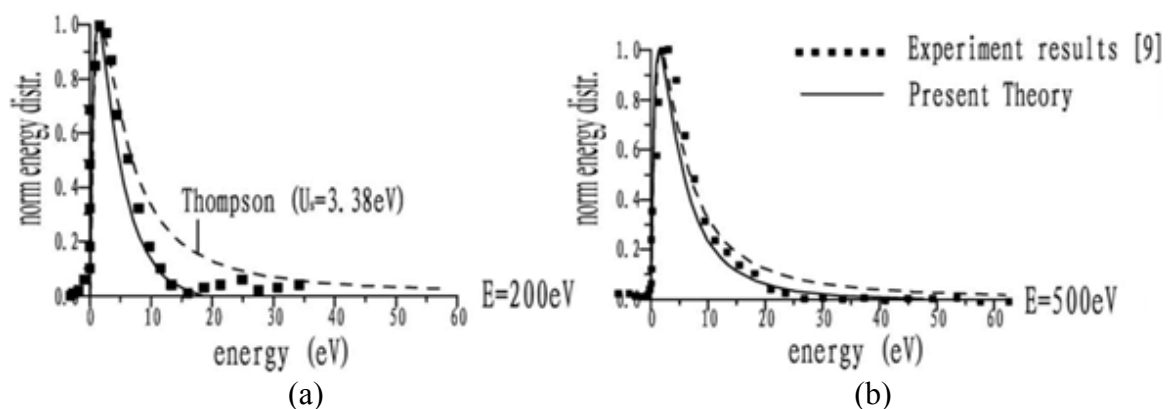


Figure 39. Fonction de distribution en énergie des particules pulvérisées d'une cible de Al sous bombardement de Ar [69]. a) Énergie d'incidence $E = 500\text{eV}$, b) $E = 200\text{eV}$.

Dans le cas plus général, pour un angle d'incidence θ_i et de pulvérisation φ_s quelconque, en regardant toujours dans le plan formé par l'ion et la surface ($\cos\theta_s = \pm 1$) la fonction de distribution en énergie est donnée par la relation suivante :

$$f_{E_s} = \frac{CE_s}{(E_s + U_s)^3} \left[1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{E_z}{E_i U_s}} \left[\cos\theta_i \sqrt{E_i \cos^2\theta_s + U_s} + \sqrt{E_i} \sin\theta_i \sin\theta_s \cos\varphi_s \right] \right]. \quad (65)$$

3.2.2.1.1 Fonction de distribution angulaire des espèces pulvérisées

Dans le cas où le bombardement est à incidence normale ($\theta_i = 0$), la fonction de distribution angulaire des particules pulvérisées f_{θ_s} est la suivante [68] :

$$f_{\theta_s} = C \cos\theta_s \left[1 - \frac{\gamma(\theta_s)}{4} \sqrt{\frac{E_{th}}{E}} \right]. \quad (66)$$

À incidence normale, la fonction de distribution f_{θ_s} est déterminée par le rapport E_{th}/E . Dans le cas limite où le rapport $E_{th}/E \rightarrow 0$, c'est-à-dire pour une pulvérisation de très haute énergie, la fonction f_{θ_s} tend vers une fonction purement cosinusoidale. Dans le cas inverse, lorsque l'énergie de bombardement s'approche de l'énergie seuil ($0.1 < E_{th}/E < 1$), on observe que certaines directions d'émission sont privilégiées. On explique ce phénomène par la transition d'un régime de cascade linéaire de collisions vers un régime de collision simple. Par simple principe de conservation de quantité de mouvement, ce régime de collision simple implique que l'angle de pulvérisation privilégié sera oblique

(typiquement $25^\circ \lesssim \theta_s \lesssim 65^\circ$). En bref, avec l'augmentation du rapport, E_{th}/E la fonction f_{θ_s} passe de la forme cosinusoidale pure vers une forme en « cœur » (fig. 40).

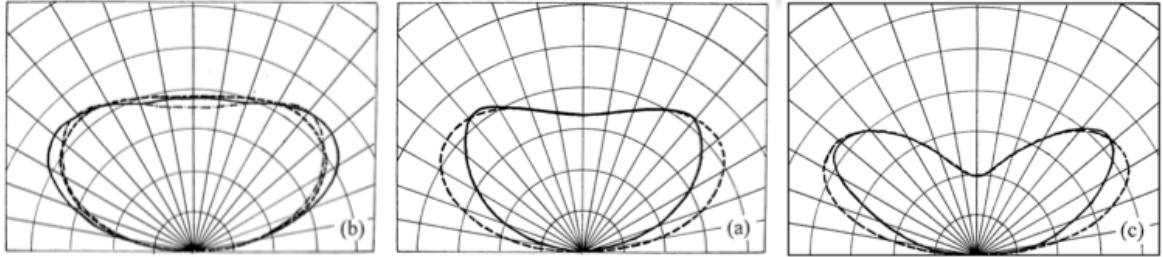


Figure 40. Fonction de distribution angulaire des particules pulvérisées à angle d'incidence normale pour des valeurs du ratio E_{th}/E de a) 0.35, b) 0.29 et c) 0.46 [68].

Pour un ion d'incidence θ_i quelconque, la fonction de distribution angulaire est la suivante :

$$f_{\theta_s} = C \cos\theta_s \left[1 - \frac{1}{4} \sqrt{\frac{E_{th}}{E}} \left[\cos\theta_i \gamma(\theta_s) + \frac{3}{2} \pi \sin\theta_i \sin\theta_s \cos\varphi_s \right] \right]. \quad (67)$$

À incidence oblique, les particules pulvérisées ont tendance à être émises dans la direction opposée à l'ion incident. Ceci est encore une fois facilement interprétable par l'application du principe de conservation de la quantité de mouvement (fig. 41).

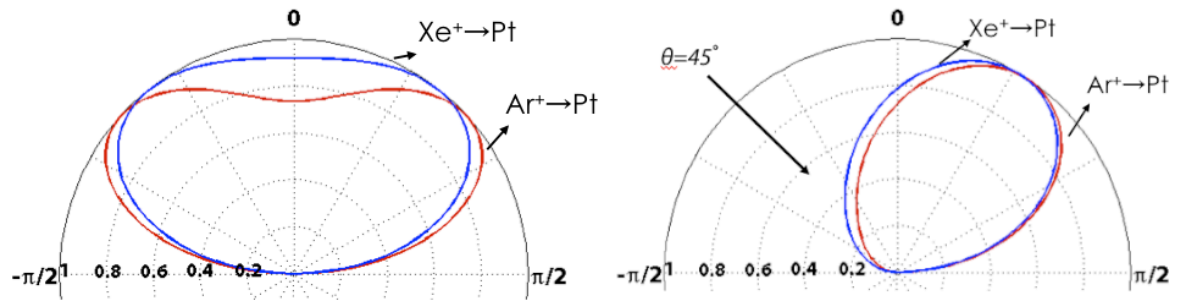


Figure 41. Fonction de distribution angulaire des particules pulvérisées d'une cible de Pt sous bombardement par Ar et Xe. a) Angle d'incidence normal $\theta=0^\circ$, b) angle d'incidence oblique $\theta=45^\circ$.

3.2.2.2 Pulvérisation de matériaux composés

Les modèles de pulvérisation ne permettent pas de prédire le rendement de pulvérisation pour un matériau composé. Si l'on connaît le nombre d'atomes de chacun des composés ainsi que leur volume atomique respectif, alors nous supposons que la gravure du matériau composé sera la somme de la gravure individuelle de chacun de ces éléments. Supposons un matériau à N espèces et g_i le nombre d'atomes d'une espèce comprise dans la cellule et V_i son volume atomique. Alors le volume occupé par chacun des composants est donné par le produit $g_i V_i$, avec lequel nous pouvons construire la liste des sommes partielles suivante :

$$F_i = \sum_{j=1}^i g_j V_j . \quad (68)$$

En supposant que la probabilité relative de frapper une des espèces du matériau composé est proportionnelle au volume occupé par celle-ci, on détermine l'espèce pulvérisée par le tirage d'un nombre aléatoire u et de la relation suivante :

$$F_{i-1} < uF_N < F_N . \quad (69)$$

3.2.2.3 Influence de l'orientation cristalline de l'échantillon

Une des propriétés d'un matériau cristallin est la présence de plans distincts possédant des énergies de liaison différentes les uns par rapport autres. Cela occasionne que le rendement de pulvérisation d'un certain plan est différent de celui d'un autre plan cristallin du même matériau. Puisque les modèles théoriques de pulvérisation supposent un matériau amorphe, ils ne peuvent rendre compte de la cristallinité du matériau. Pour inclure cet effet dans le simulateur, nous devons extraire les rendements de pulvérisation de données expérimentales (fig. 42). En général, puisque certains plans ont un rendement de gravure supérieur aux autres, lors de la gravure de matériau cristallin, on remarquera sur le profil l'apparition de faces orientées selon les plans cristallins ayant une énergie de liaison supérieure, c'est-à-dire ceux étant les plus difficiles à graver.

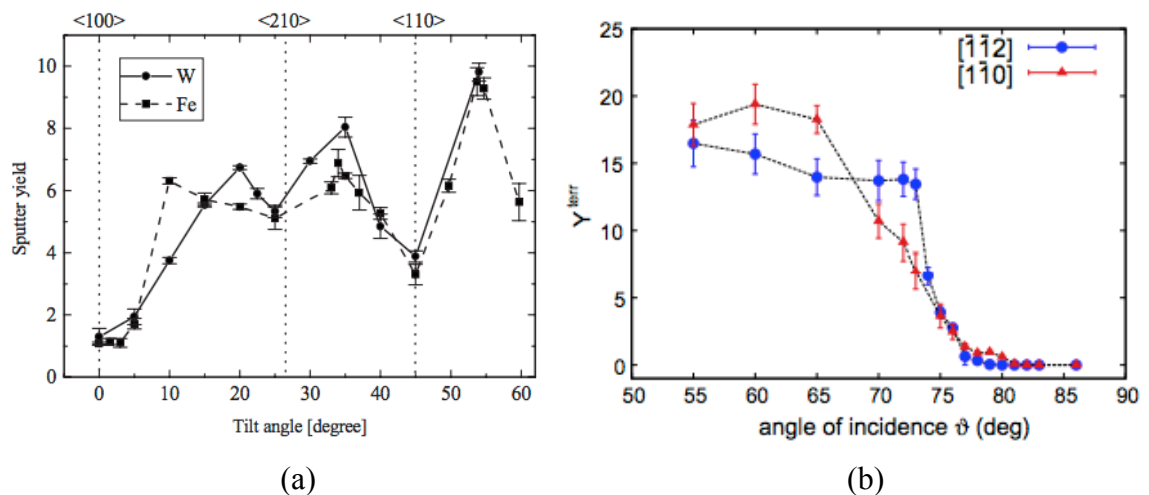


Figure 42. a) Dépendance angulaire de la pulvérisation de métaux cristallins par bombardement ionique [158]. b) Dépendance angulaire de la pulvérisation du Pt par Ar^+ selon deux plans cristallins [159].

3.2.3 Gravure réactive

Revenons à l'ensemble de réactions de surface (éq. 46), alors le flux de radicaux A adsorbé est donné par :

$$\Gamma_{ads} = \Gamma_i s_0 (1 - \theta) . \quad (70)$$

Le flux de particules associé au produit de gravure désorbé Γ_r est directement proportionnel au degré de recouvrement des sites :

$$\Gamma_r = \beta K_r n_\theta \theta \quad (71)$$

où n_θ est la densité surfacique du site d'adsorption. Puisque dans les systèmes de gravure réactive habituels, on peut négliger la recombinaison des radicaux vers la phase gazeuse, à l'état stationnaire on atteint un équilibre du nombre de sites occupés sur la surface. En résolvant l'équation de bilan des sites pour θ , on obtient la relation suivante :

$$\theta = \frac{\Gamma_i s_0}{(\Gamma_i s_0 + \beta K_r n_0)} . \quad (72)$$

On obtient finalement le flux de création de l'espèce volatile $\beta A: B$:

$$\Gamma_r = \frac{\beta K_r n_0}{(1 + \beta K_r n_0 / \Gamma_i s_0)} . \quad (73)$$

3.2.4 Gravure réactive assistée par bombardement ionique

Pour déterminer le degré de recouvrement, on procédera de façon similaire à la cinétique des sites d'adsorption établie dans la section précédente. Par contre, une différence notable provient du fait que le flux ionique, en pulvérisant des atomes de surface, empêche le système d'atteindre le même équilibre. On ne pourra donc pas traiter le système en supposant qu'il atteint instantanément l'équilibre (recouvrement des sites) comme on le supposait dans le cas purement réactif. À partir du même formalisme que dans la section précédente, on peut établir l'équation de bilan des sites :

$$\frac{d\theta}{dt} = \frac{\Gamma_i S_0 (1 - \theta)}{n_\theta} - \frac{\beta K_r \theta}{n_\theta} . \quad (74)$$

Pour suivre l'évolution du degré de recouvrement à chaque itération, il suffit d'effectuer l'intégration temporelle de l'équation précédente. Pour ce faire, on appliquera simplement la différence finie (avant) du premier ordre :

$$\theta_{N+1} = \theta_N + \frac{d\theta_N}{dt} \Delta t . \quad (75)$$

Lors de l'impact d'un ion avec la surface, la probabilité de frapper un site couvert est directement donnée par le degré de recouvrement à l'instant de la collision. Puisque la présence d'une couche réactive modifie le rendement de pulvérisation, nous devons, similairement à la pulvérisation d'un matériau composé, adapter le rendement en conséquence (fig. 43). Pour bien imaginer l'influence du flux ionique, on trace (fig. 43) la courbe temporelle du bilan des sites pour diverses valeurs du flux ionique.

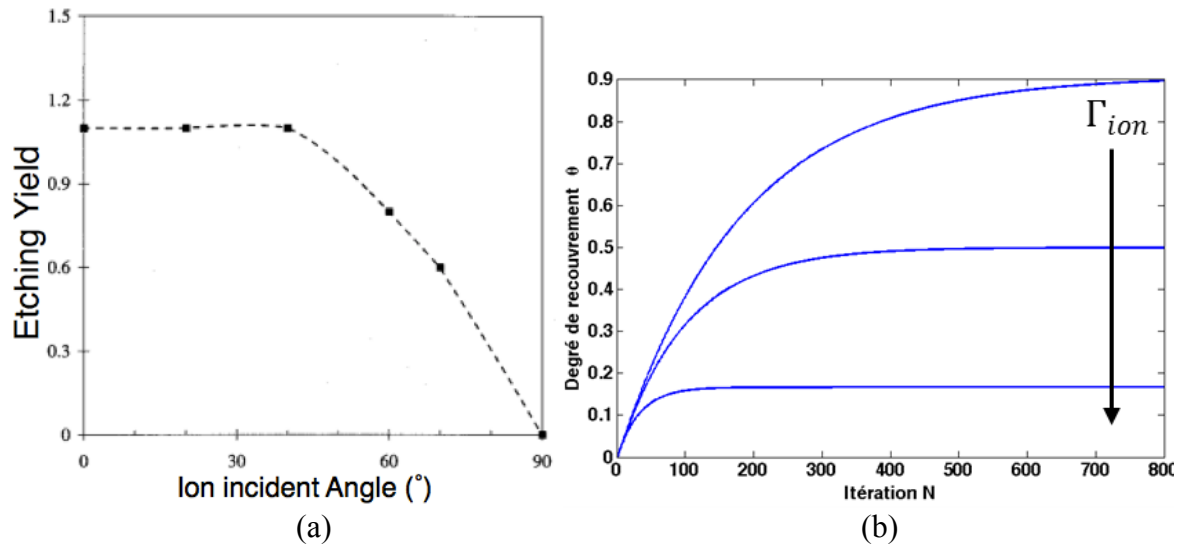


Figure 43. a) Dépendance angulaire du rendement de gravure du Si par Cl et Cl⁺ à 35eV pour un ratio de flux neutre/ion de 200 [160]. b) Évolution du degré de recouvrement θ avec l'augmentation du flux ionique Γ_{ion} . L'augmentation du flux Γ_{ion} occasionne la diminution du degré de recouvrement θ .

3.2.5 Réflexion sur les parois

Lors de la gravure de tranchées, puisque les ions sont quasi parallèles aux parois de celles-ci, ceux-ci les frappent avec un angle d'incidence très grand. Plusieurs ouvrages [161-163] ont démontré que dans ce cas, il existe une probabilité importante pour que ces ions soient réfléchis sur les parois avant de poursuivre leur parcours vers le fond de la tranchée. Les ions sont principalement réfléchis dans la direction spéculaire. Par contre, étant donné la rugosité de la surface au niveau atomique, on observe une certaine distribution autour de l'angle spéculaire (fig. 44). En l'absence de données expérimentales, nous modéliserons ce phénomène par deux paramètres, soit l'angle critique θ_c qui définit l'angle d'incidence à partir duquel les ions commencent à être réfléchis et $\Delta\theta$ la largeur à mi-hauteur de la distribution gaussienne autour de l'angle de réflexion spéculaire (fig. 44).

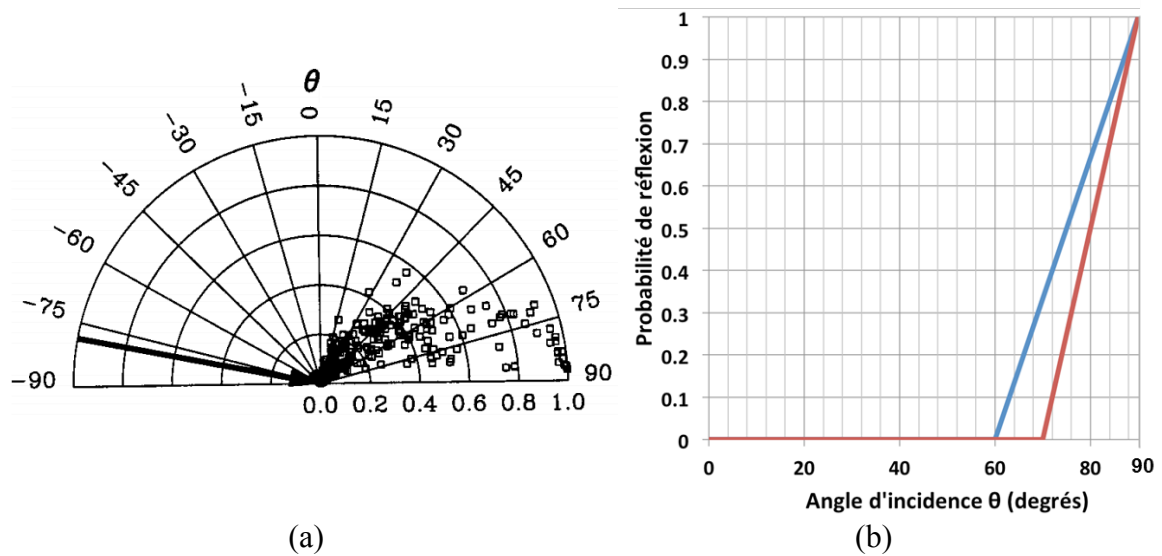


Figure 44. a) Distribution angulaire expérimentale des ions réfléchis après une collision à un angle d'incidence de 80° [163], b) Modèle de probabilité de réflexion défini par l'angle d'incidence critique θ_c .

3.2.6 Dépôt des espèces non réactives

La modélisation du dépôt des espèces non réactives est similaire au problème de l'adsorption des particules réactives sur la surface. Le transport de ces particules est traité de façon indiscernable des particules réactives (section 3.1.1), la différence se situant seulement au niveau des coefficients de réactions à la surface. Lors du dépôt d'une couche mince, on choisit des particules qui n'érodent pas la surface et peuvent ainsi s'accumuler. Lors de la présentation du modèle de gravure réactive, nous avons implicitement limité, pour simplifier la résolution, l'épaisseur des particules réactives adsorbées à une monocouche, alors que dans le cas des particules non réactives l'épaisseur de la couche peut croître indéfiniment. On se limitera dans cet ouvrage à la modélisation du dépôt physique des particules, c'est-à-dire un dépôt effectué directement à partir d'un flux de particules et ne nécessitant aucune chimie de surface tel que ce serait le cas pour un procédé de dépôt chimique en phase vapeur. Comme nous l'avons vu au premier chapitre,

le dépôt physique en phase vapeur peut être effectué soit à l'aide d'un flux de particules neutres thermiques ($\approx 1000 K$), ou par des particules cinétiques telles que les particules pulvérisées ou des ions de faibles énergies.

3.2.6.1 Dépôt physique des particules thermiques

Puisque ces particules proviennent de la phase gazeuse avec une distribution isotrope, le calcul du flux de particules déposées est directement obtenu à partir de la méthode présentée dans la section 3.1.1. Une fois le flux de particules calculé en toute cellule de surface, il suffit d'ajouter la quantité de matière proportionnelle au flux reçu depuis la dernière itération du processus. Pour obtenir un comportement physique réaliste, tout en maintenant un temps de calcul raisonnable, on choisira un pas de temps qui fera en sorte que la masse de matière ajoutée à chaque itération ne dépasse pas, par exemple, un dixième de la masse maximale du fait de la taille de la maille choisie.

3.2.6.2 Dépôt physique des particules cinétiques

On parle de particules cinétiques lorsque celles-ci possèdent une énergie importante par rapport aux espèces neutres de la décharge ($\gtrsim 1 eV$). Dans le détail atomistique, lorsqu'un atome énergétique se dépose sur une surface, un transfert d'énergie s'effectue vers les atomes voisins du site d'adsorption. En fonction de la quantité d'énergie transférée, divers phénomènes peuvent se produire. Ceux-ci ont comme conséquence globale de reconstruire localement la surface (fig. 45).

La simulation de type cellulaire ne permettant pas le traitement atomistique détaillé de la croissance de couche mince, un modèle de croissance cellulaire doit être employé. On doit

donc utiliser un modèle qui, tout en omettant le calcul détaillé au niveau atomistique, permette une simulation réaliste de la croissance de couche mince à l'échelle sous-micrométrique.

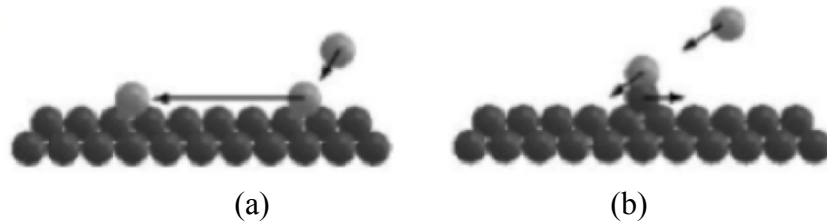


Figure 45. Adsorption d'un atome énergétique a) Diffusion dirigée de l'atome déposé. b) Déplacement d'un atome de surface lors du dépôt.

Le modèle utilisé dans le simulateur est inspiré d'un article de Das Sarma et Tamborenea [164]. Il s'agit d'un modèle simple 2D à deux paramètres qui se résume à allouer une probabilité p de diffusion vers le minimum local d'énergie compris à l'intérieur d'une zone de rayon r autour du point d'impact (fig 46). Une modification par rapport au modèle original doit être effectuée pour l'adapter au concept de simulation cellulaire de la surface. Cette modification s'opère lors de l'identification du minimum local d'énergie. Dans le modèle original, on identifie le site ayant un maximum de voisins comme le site de destination, alors que dans notre modèle on doit effectuer un calcul sous-cellulaire pour déterminer le nombre de voisins.



Figure 46. Vue schématisée du calcul du nombre de voisins lors du dépôt d'adatoms.

3.2.6.3 Rétrodiffusion des espèces pulvérisées

Lorsque les particules pulvérisées non volatiles sont expulsées du profil, celles-ci sont thermalisées après quelques collisions dans la phase gazeuse. Une fois dans la décharge, elles peuvent ainsi être ionisées par impact électronique ou tout simplement être transportée par diffusion, comme les autres espèces neutres du plasma. La distance de thermalisation dépend du libre parcours moyen des particules dans la phase gazeuse et donc, ultimement, de la pression de fonctionnement de la décharge. Avec l'augmentation de la pression, la distance de thermalisation diminue, ce qui implique une augmentation du flux d'atomes rétrodiffusés vers le motif. Ce flux d'atomes rétrodiffusés (par collision) vers le motif, ce qui cause une diminution globale de la vitesse de gravure (fig. 47).

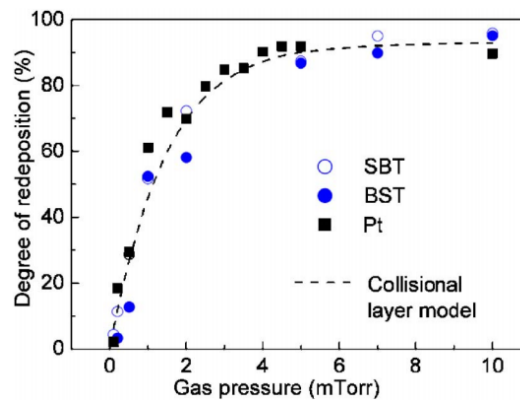


Figure 47. Dépendance de la pression sur le degré de redéposition lors de la pulvérisation de SBT, BST, Pt dans une décharge d'argon [42].

Il a été démontré par simulation [165] que le flux rétrodiffusé vers la surface est homogène à l'échelle des motifs micro et sous-micrométrique. Dans le même article, on démontre également que la majorité du flux rétrodiffusé est sous forme de particules neutres. Suite à cet argument, nous supposons que le flux d'atomes rétrodiffusé est isotrope et indiscernable d'un flux de particules neutres provenant de la phase gazeuse. Pour modéliser ce phénomène, le simulateur calcule le flux de particules quittant le

domaine de simulation et injecte en conséquence un flux thermique proportionnel au degré de redéposition (fig. 47)

3.2.7 Diffusion de surface

Dans une simulation cellulaire, le comportement atomistique individuel ne peut être décrit d'où la difficulté de modéliser la diffusion de surface. Ce n'est généralement pas un obstacle pour la simulation de l'évolution du profil du moment que la longueur de diffusion moyenne est inférieure à la taille de la cellule. De plus, puisque lors du dépôt, on affecte une probabilité de diffusion instantanée vers le minimum local d'énergie, cette description permet généralement de simuler de façon réaliste l'évolution de la croissance des couches minces à l'échelle sous-micrométrique. Sous certaines conditions, par exemple à haute température, l'influence de la diffusion de surface peut devenir importante sur l'échelle du temps du procédé. C'est pourquoi, afin de développer un simulateur complet, nous proposons un modèle de diffusion de surface cellulaire basé sur la méthode de Monte-Carlo cinétique (on ne reprend pas la présentation de la méthode puisqu'elle est déjà introduite dans la section 2.2). Puisqu'on ne rend pas compte de la structure cristalline, cette méthode consiste à attribuer une probabilité de diffusion identique aux événements considérés équiprobables. On identifie ces transitions selon certaines règles simples de façon similaire aux algorithmes de diffusion par automate cellulaire [166-169]. Sans entrer dans le détail de l'algorithme, les paramètres ajustables sont les probabilités de diffusion pour un site isolé, la taille critique des germes au-delà de laquelle ils ne peuvent se dissocier, donner ou non la possibilité aux atomes de se détacher d'une marche et allouer ou non une probabilité de diffusion pour la montée ou la descente d'une marche (barrière de Ehrlich-Schwoebel). Bien que le modèle de diffusion de surface proposé ne puisse être utilisé pour relier les valeurs microscopiques des coefficients de diffusion aux paramètres du simulateur, en ajustant les paramètres, ce modèle permet tout de même de décrire de façon réaliste l'évolution de la croissance d'une couche mince. Ainsi, une fois les paramètres identifiés pour le système étudié, le

simulateur gagne un aspect prédictif même si la physique sous-jacente n'est pas totalement résolue.

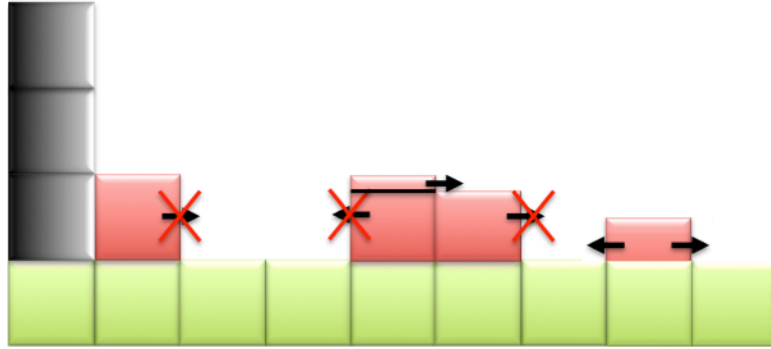


Figure 48. Schématisation des différentes probabilités de diffusion dans l'algorithme de diffusion cellulaire.

3.3 Référence de la littérature scientifique

Cette section présente, à titre de référence, une revue rapide de la littérature sur la simulation de profils de gravure et de dépôt. Le premier simulateur recensé dans la littérature fut développé par un groupe de chercheurs de l'université de Californie à Berkeley en 1980 [170]. Ce simulateur utilise une méthode de nœuds où sont calculées les vitesses de gravure et de dépôt pour faire évoluer la topographie en faisant abstraction des différents mécanismes physiques en jeu. Vers les mêmes années, le centre de recherche de Xerox en Californie publia un article portant sur une méthode de simulation de dépôt par pulvérisation magnétron [171]. Ce simulateur tenait compte de la distribution angulaire des espèces pulvérisées ainsi que de leur transport non collisionnel vers le substrat rotatif. En 1988 [172], un groupe de chercheurs de l'université d'Alberta élaborera une méthode de simulation de dépôt qui était révolutionnaire à l'époque. Cette technique simulant le dépôt par des sphères solides fut la première permettant de rendre compte de la microstructure

des couches minces. Ces différents travaux furent des réalisations pionnières dans le domaine puisque ce n'est qu'à partir des années 1990, certainement en lien avec l'accessibilité toujours grandissante des unités de calcul performant, que le nombre de publications dans le domaine explosa. Depuis ce temps, l'attention des chercheurs se porta surtout sur la simulation de profils de gravure ionique réactive [142, 163, 173-177]. En particulier, plus récemment, on s'est intéressé à la simulation de procédés de gravure ionique réactive profonde tels que le procédé Bosch [96, 178-180] et la gravure cryogénique [181]. Au cours des dernières années, la croissance fulgurante de la puissance des unités de calculs a rendu accessible la simulation de l'évolution des profils par dynamique moléculaire [182-185]. Dans un futur rapproché, en s'approchant de la limite atomistique, ce type de simulation deviendra essentiel pour décrire de nouveaux mécanismes où les autres types de simulation ne peuvent rendre compte de façon adéquate les phénomènes physiques en jeu.

3.4 Contribution personnelle et originalité du projet

La simulation de profils de gravure et de dépôt mène chaque année à une quantité importante de publications. Le point de départ du présent projet provient du travail de thèse de doctorat [192] de Jérôme Saussac publié en 2009. Bien qu'à l'époque ce simulateur ait pu être utile pour améliorer notre compréhension de certains phénomènes, plusieurs lacunes intrinsèques à l'élaboration du modèle en limitaient l'utilisation.

Dans cette optique, en reprenant le projet j'ai décidé de procéder à une réécriture complète du logiciel tant au niveau des routines de calculs que de la structure complète du code. Cette décision était nécessaire puisque le code avait été écrit d'un seul bloc, donc difficilement réutilisable. Qui plus est il était peu optimisé et contenait plusieurs *bogues* responsables d'erreurs lors de l'évolution du profil. Notons ici que le code a été développé

dans le langage de programmation C et que toutes les routines ont été écrites par moi-même, sauf exception pour la routine `ran2()` (générateur de nombre aléatoire) qui provient de « Numerical Recipes in C » [138] ainsi que l'utilisation de la bibliothèque graphique GD pour le traitement d'images. Voici une liste non exhaustive des lacunes les plus importantes identifiées dans le simulateur Saussac et les solutions implémentées dans le présent travail :

Saussac 2009 [139]	Le modèle développé
<p><u>Résolution de 200x200 cellules</u></p> <p>Insuffisante pour la simulation de profils de l'ordre du micromètre, comme pour les profils en T inversé (section 4.2).</p>	<p><u>Résolution de 1280x1024 cellules</u></p> <p>Amélioration par un facteur 32 (40000 cellules auparavant versus 1310720 cellules) et donc une résolution suffisante pour la simulation de profils de l'échelle du micromètre tout en gardant une précision de l'ordre du nanomètre.</p>
<p><u>Performance inadéquate.</u></p> <p>La simulation d'un profil de gravure prenait environ 2h pour être exécuté, ce qui est plus long que de faire l'expérience en laboratoire et alors vraiment inadéquat.</p>	<p><u>Performance adéquate</u></p> <p>Le temps d'exécution de la simulation d'un profil de gravure standard est de l'ordre de 5 minutes (beaucoup plus rapide que d'aller au laboratoire). En incluant l'amélioration de la résolution et le temps d'exécution, j'estime de façon très conservatrice que la performance fut augmentée d'un facteur $(32 \cdot (120/5)) = 768$, facteur probablement beaucoup plus élevé en réalité.</p>
<p><u>Aucun algorithme de dépôt ou de diffusion.</u></p> <p>La croissance des couches minces, par exemple lors du redépôt des particules pulvérisées, donne un résultat non physique. La simulation semble fonctionner à première vue (dans les instants initiaux), mais en la laissant</p>	<p><u>Algorithme de dépôt par relaxation ainsi qu'un modèle de diffusion par Monte-Carlo cinétique.</u></p> <p>Avec ce modèle on obtient un comportement réaliste de la croissance des couches minces, même à l'échelle nanométrique. La stabilité de l'algorithme fait en sorte que l'on peut</p>

s'exécuter plus longtemps on s'aperçoit rapidement que plusieurs bogues sont présents dans l'algorithme de croissance, qui mènent à des résultats erronés.

Modèle incomplet de la gravure par pulvérisation ionique

Par exemple, le calcul du rendement de pulvérisation ne tient pas compte de l'énergie d'incidence des ions. De plus, les distributions en énergie et en angle des particules pulvérisées ne sont pas décrites de façon physique.

Modèle incomplet de la gravure réactive

Aucun calcul du flux local des particules neutres. Le flux des neutres est simplement supposé être le même en tout point de la surface et approximé par celui d'une surface plane.

Impossibilité de simuler des flux de plusieurs espèces ioniques et neutres.

La distribution en énergie des particules incidentes sur la surface est assumée mono énergétique.

Le redépôt par rétrodiffusion des espèces pulvérisées est effectué par un dépôt aléatoire sur un élément de surface, ce qui ne représente pas du tout la physique en jeu.

exécuter indéfiniment le simulateur et conserver un comportement physique adéquat.

Modèle réaliste de la gravure par pulvérisation ionique

Le rendement de pulvérisation est calculé selon l'énergie et l'angle des particules incidentes à l'aide d'un modèle physique qui permet également d'évaluer les distributions en angle et en énergie des particules pulvérisées.

Calcul du flux local de particules réactives

Le présent modèle prend en compte l'effet du motif sur l'ombrage des neutres et permet de calculer une distribution du flux réaliste à l'intérieur de la tranchée.

Il est possible de définir un nombre illimité de flux concurrent ayant chacun leur propres fonctions de distributions.

L'insertion des particules dans le domaine de simulation est effectuée à l'aide de l'échantillonnage des fonctions de distribution en énergie.

Le redépôt est réalisé en ajoutant une source de particules thermalisées provenant de la phase gazeuse. Ensuite le transport est traité de façon réaliste jusqu'à l'interaction avec la surface.

CHAPITRE 4.

SIMULATION DE PULVÉRISATION ET DE DÉPÔT DE COUCHE MINCE DE PLATINE

L'utilisation du platine dans le domaine des micros/nanotechnologies est traditionnellement réservée à la conception d'électrodes pour les circuits intégrés. Ses qualités de métal à haute conductivité électrique, ainsi que sa grande stabilité chimique et thermique en font un matériau tout désigné pour cette utilisation [186]. Ces propriétés ont également attiré l'industrie des MEMS où on retrouve le platine sous forme de couche mince comme matériau résistif dans des composantes telles que les capteurs piézoélectriques et les microanémomètres à effet cantilever [95, 187]. Récemment, la croissance de nanofil a été réalisée pour des applications comme la détection de gaz [188] et la conception de nanomoteurs [189]. Puisque la surface du platine est chimiquement inerte, l'unique mécanisme actif lors de la gravure est la pulvérisation par le bombardement ionique. Du point de vue de l'étude fondamentale du phénomène de pulvérisation, cette propriété est très intéressante puisque l'absence de chimie de surface en fait un système relativement simple à modéliser. Les produits de pulvérisation n'étant pas volatils, les profils de gravure du platine sont couramment accompagnés de microstructures non désirées causées par le redépôt sur les parois (Fig. 49).

La simulation de l'évolution du profil devra à la fois adéquatement modéliser la pulvérisation de la surface ainsi que la croissance de couche mince de platine. Pour ce faire, nous nous intéresserons à la gravure par bombardement ionique de basse énergie du platine dans des décharges de hautes densités de gaz nobles (Ar, Xe, Kr).

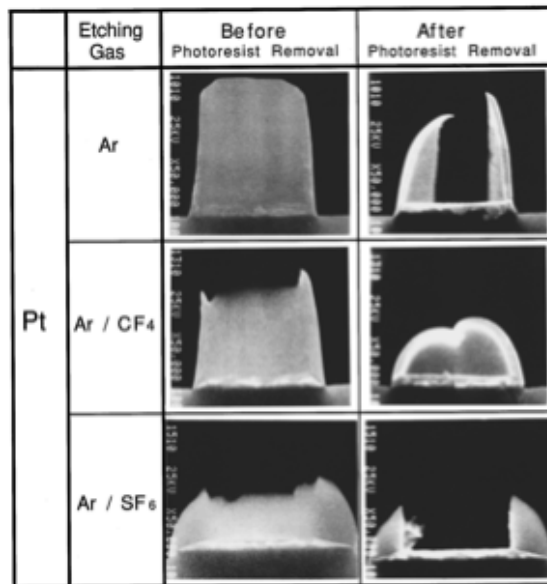


Figure 49. Influence du mélange de gaz sur le profil de gravure et l'épaisseur de platine redéposé sur les parois [190].

L'utilisation de ces gaz permet à la fois d'atteindre une bonne vitesse de gravure ainsi qu'une excellente sélectivité puisqu'ils n'engendrent pas de chimie à la surface des résines photosensibles [191]. Selon les conditions opératoires, la gravure chimique de la résine libère des segments de polymères en quantité suffisante pour contaminer de façon importante les couches redéposées sur les parois et, à plus haute pression, le fond de la tranchée [190]. La simulation de la pulvérisation de tranchées étant le cas le plus simple permettra dans un premier temps de déterminer les paramètres de simulation importants et d'ainsi réduire le nombre de paramètres libres lors de simulation de profils plus complexes. Pour ce faire, on observera l'influence de la largeur du motif sur les angles des parois, de l'épaisseur de platine redéposé ainsi que l'importance du phénomène de microtranchée. En somme, cette étude servira d'étape de rodage du simulateur. Ainsi, une fois ce système simple résolu, on utilisera les paramètres identifiés pour vérifier la validité du modèle en simulant des géométries plus complexes.

4.1 Gravure de tranchées

On s'intéresse premièrement à la gravure de motifs de $2\ \mu\text{m}$ par pulvérisation dans un plasma d'argon à une pression de 2.5 mTorr sous une tension de polarisation du substrat de 50 V. On mentionne premièrement que pour l'ensemble des simulations présentées dans ce mémoire, les cellules ont une taille de $10\ \text{nm} \times 10\ \text{nm}$. La dépendance énergétique du rendement de pulvérisation a été ajustée ($E_z = 80\ \text{eV}$) par comparaison aux données expérimentales (fig. 37). Cette valeur du paramètre E_z génère une distribution en énergie des particules pulvérisées dont la valeur moyenne est de $7.2\ \text{eV}$ (fig. 50).

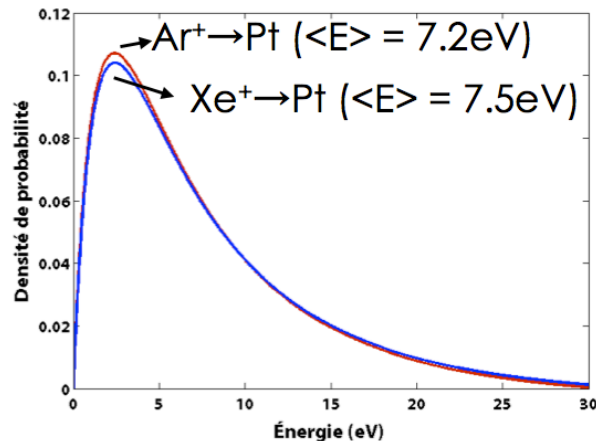


Figure 50. Distribution en énergie des particules pulvérisées d'une surface de Pt sous l'effet du bombardement d'ions Ar et Xe.

À l'échelle micrométrique, le dépôt de platine dans ces conditions énergétiques forme une couche dense puisque l'énergie des atomes pulvérisés est suffisante pour reconstruire la surface lorsqu'ils s'y redéposent. Les paramètres de dépôt (section 3.2.6) utilisés sont $r = 2\ \text{cellules}$ ($20\ \text{nm}$), $p = 1$, le coefficient de collage platine résine = 0.05 et platine platine = 0.95 [192]. Puisqu'aucune donnée de qualité sur la dépendance en angle d'incidence du rendement de pulvérisation n'est disponible dans la littérature, le logiciel de simulation SRIM a été utilisé pour générer cette fonction (fig. 38). La distribution angulaire des particules éjectées est déterminée par l'équation (67) en utilisant comme

paramètre $E_{th} = 30 \text{ eV}$. La largeur à mi-hauteur de la fonction de distribution angulaire des ions incidents (6°) et l'angle critique θ_c de probabilité de réflexion sur les parois (75°) ont été déterminés par comparaison entre le profil simulé et celui observé en laboratoire par microscopie (fig. 51).

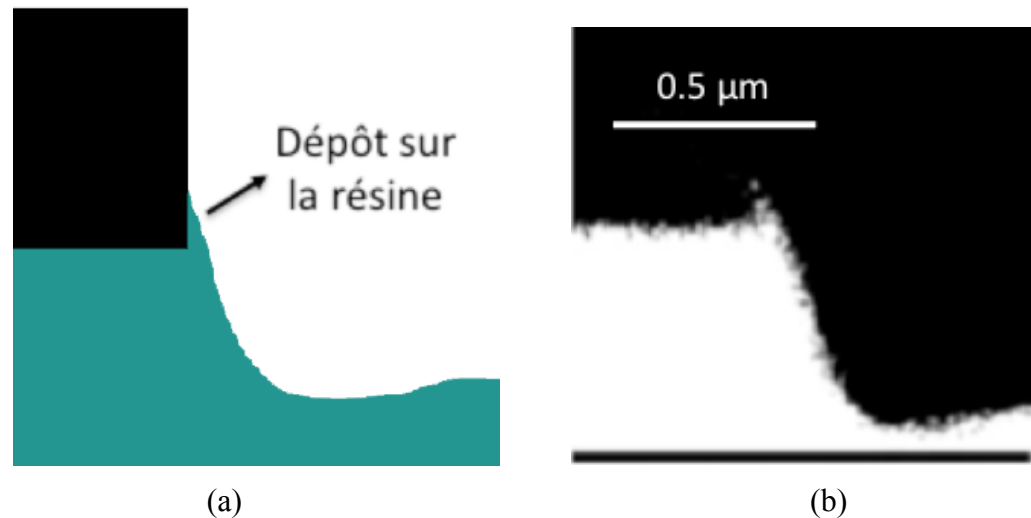


Figure 51. a) Simulation du profil de gravure d'une tranchée de $2 \mu\text{m}$ de platine par pulvérisation dans un plasma d'argon à une pression de 0.5 mTorr et avec une tension de polarisation de 50 V b) Données expérimentales dans les mêmes conditions [98]

Pour vérifier la fiabilité de la simulation, nous avons examiné l'accord entre les angles d'inclinaison des parois ($\sim 65^\circ$), la profondeur de la légère microtranchée occasionnée par la réflexion des ions sur les parois de la résine ($\sim 50 \text{ nm}$), l'épaisseur du platine déposé au point de contact le plus bas avec la résine ($\sim 70 \text{ nm}$) et la hauteur du dépôt de platine sur la paroi ($\sim 110 \text{ nm}$). Chacun de ces paramètres étant comparable aux observations, on peut affirmer que l'on obtient un excellent accord entre les profils simulés et expérimentaux. Le redépôt du platine lors de la gravure à basse pression ($< 5 \text{ mTorr}$) est donc bien décrit par le dépôt balistique des atomes pulvérisés de la surface.

Pour confirmer davantage la justesse des paramètres de simulation identifiés ci-dessus, nous avons simulé la gravure d'une tranchée de $0.5\ \mu\text{m}$ sous des conditions légèrement différentes, soit dans un plasma d'argon à $0.5\ \text{mTorr}$ avec une tension de polarisation de $100\ \text{V}$. Dans ces conditions, on observe [191] que dans de telles conditions le profil présente une forme en « V » plutôt que la forme en « W » normalement obtenue pour des largeurs de motifs plus élevées (fig. 52). Les rendements de pulvérisation furent générés comme préalablement. Par contre les paramètres de dépôt du platine ne devant pas être affectés par rapport au cas à $2.5\ \text{mTorr}$, nous les avons conservés à l'identiques. Le seul paramètre libre par rapport au cas précédent est la largeur à mi-hauteur de la dispersion angulaire des ions incidents. Puisque la valeur de la tension de polarisation est plus élevée, on s'attend, dans la limite du cas des basses pressions, à une dispersion plus faible que précédemment. En débutant avec la valeur précédente, nous avons ajusté la valeur de la dispersion angulaire jusqu'à ce que nous obtenions un accord entre les profils. Cet accord fut obtenu pour une largeur à mi-hauteur de 4° (fig. 53)

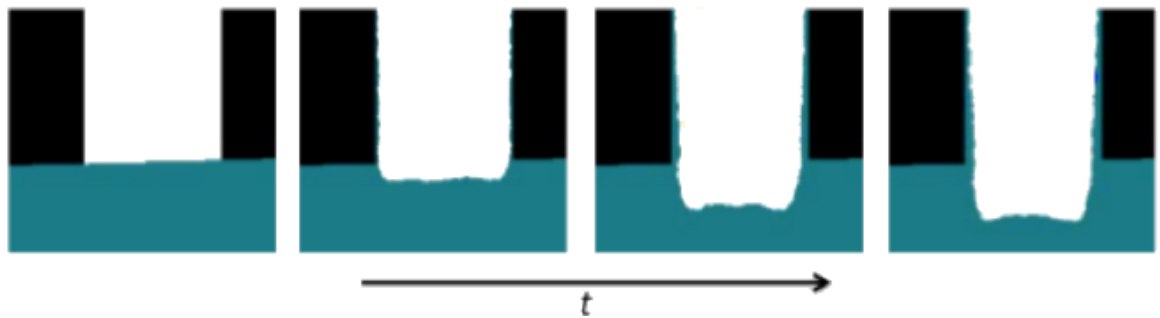


Figure 52. Simulation du profil de gravure d'une tranchée de $2\ \mu\text{m}$ de platine par pulvérisation dans un plasma d'argon à une pression de $0.5\ \text{mTorr}$ et avec une tension de polarisation de $50\ \text{V}$. La deuxième image correspond au temps de gravure requis pour atteindre le profil présenté dans la figure 51.

En comparant les profils, on observe que les angles des parois sont très similaires ($\sim 70^\circ$) et que si peu de platine est redéposé sur le haut des parois qu'il est retiré lors du nettoyage de

la résine. On constate toute de même un léger dépôt de platine dans le bas des parois, ce qui est également le cas dans le profil expérimental.

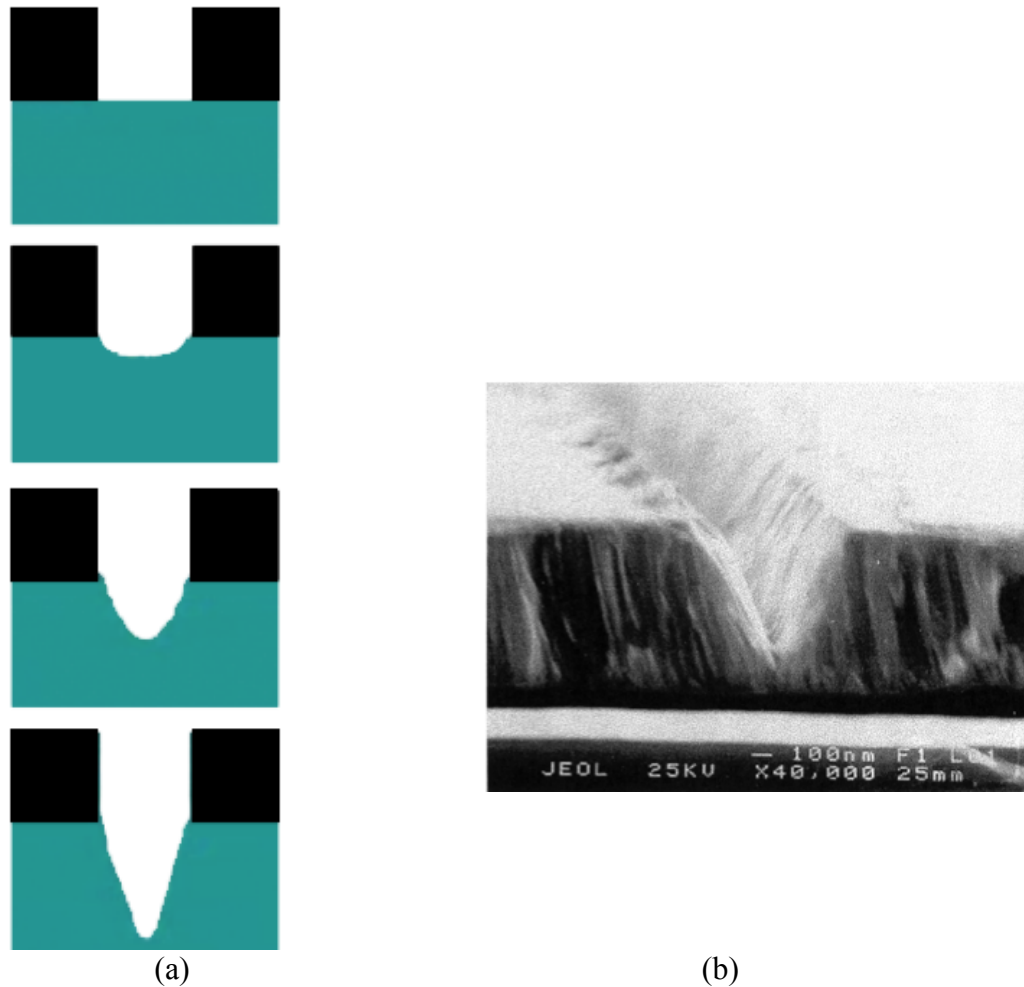


Figure 53. (a) Simulation du profil de gravure d'une tranchée de $0.5 \mu\text{m}$ par pulvérisation dans un plasma d'argon à une pression de 0.5 mTorr et avec une tension de polarisation de 100 V (b) Données expérimentales sous les mêmes conditions [191].

Encore une fois, le profil simulé est en excellent accord avec le profil expérimental comme en témoigne la figure 54. Dans cette figure, la perspective du profil simulé est ajustée pour correspondre à la vue prise par le microscope. De cette façon, on obtient une superposition quasi parfaite par rapport au profil expérimental. En conclusion, le passage du profil en « W » vers le profil en « V » est donc simplement occasionné par la réflexion

des ions de part et d'autre de la tranchée, ce qui a pour effet de focaliser le flux vers le centre de la tranchée.

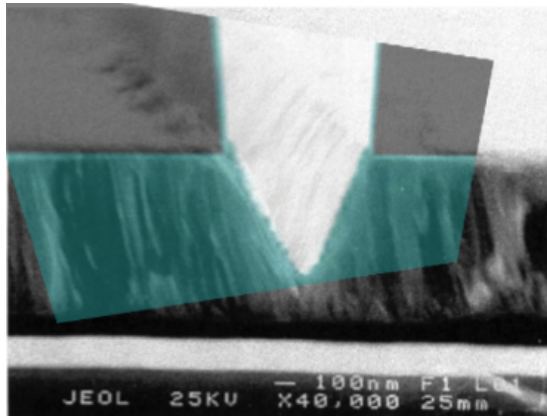


Figure 54. Superposition du profil simulé, par ajustement de la perspective, et du profil expérimental présenté dans la figure 53

4.2 Gravure de profils en T inversé

La particularité du profil en T inversé (fig. 55) est la présence d'une cavité large rejointe par une tranchée standard étroite par laquelle pénètrent les espèces responsables de la gravure. L'intérêt principal d'étudier ce type de motif est de découpler le redépôt balistique direct des espèces pulvérisées et le redépôt indirect engendré par la rétrodiffusion des espèces pulvérisées expulsées de la cavité après leur interaction avec la phase gazeuse. La conversion du profil nécessaire pour son utilisation dans le simulateur fut achevée à l'aide d'un logiciel d'édition d'image et d'un filtre de détection des bords. Lors de cette reconnaissance, les sections des profils expérimentaux initiaux démontrant une rugosité de surface excessive ont été adoucies puisque cette rugosité induit des erreurs importantes lors du calcul des vecteurs normaux.

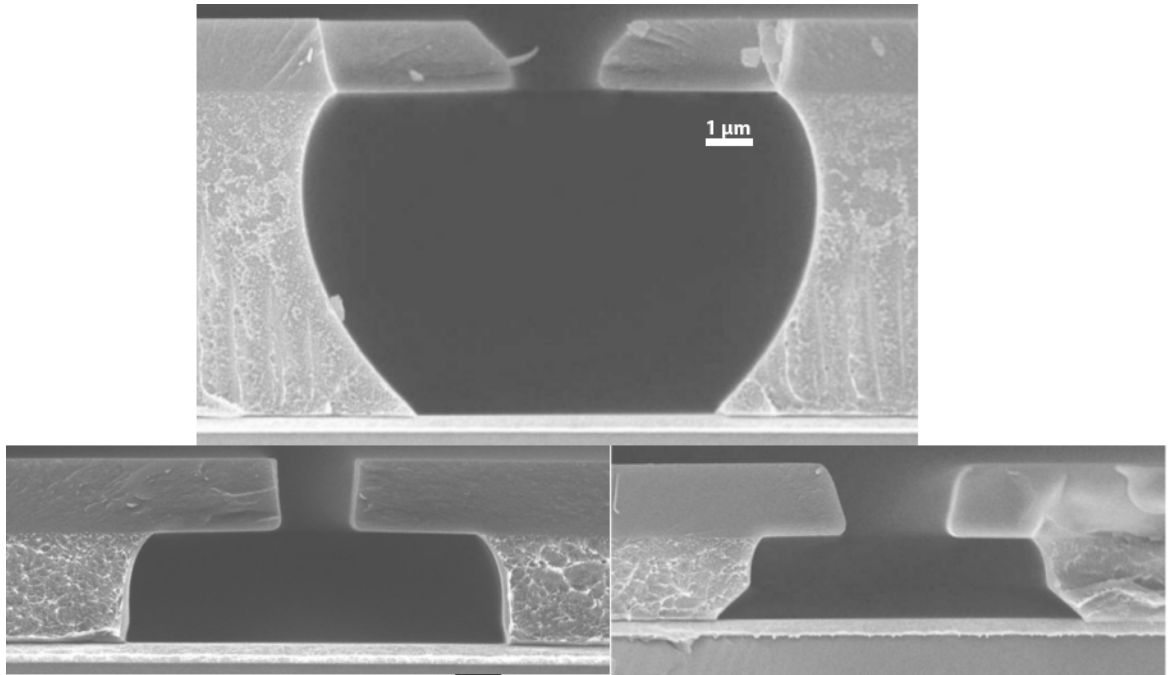
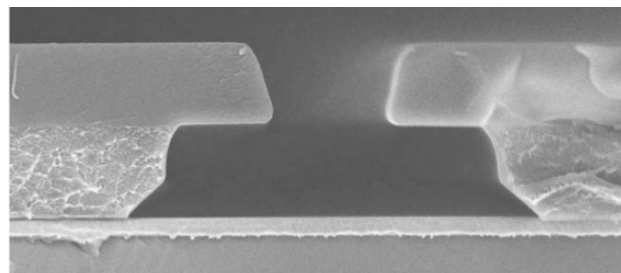


Figure 55. Trois différentes géométries de motifs en T inversé avant la gravure. La largeur de la tranchée varie entre environ 2 μm et 6 μm (non présenté sur la figure)



(a)



(b)

Figure 56. (a) Exemple de profil initial obtenu par microscopie comparée au (b) profil converti pour le simulateur

Les échantillons furent gravés dans un réacteur à couplage inductif Oxford Plasmalab 100 model ICP380 (section 1.2.2) à l'aide d'une décharge d'argon ou de xénon opérant à une pression variant entre 1 mTorr et 30 mTorr. Les tensions de polarisation du porte-substrat varient entre 75 V et 150 V.

4.2.1 Cas à basse pression

À basse pression, le redépôt des espèces pulvérisées par rétrodiffusion est négligeable. Donc, dans les mêmes conditions de décharge que dans la section 4.1, la simulation de l'évolution du profil devrait être juste en utilisant des paramètres d'entrée similaires pour le simulateur. Cette hypothèse semble bien confirmée en comparant les profils présentés aux figures 57 et 58. En particulier la figure 59 présente une superposition des profils qui démontre un accord quasi parfait entre la simulation et les données du laboratoire. La figure 60 présente les résultats pour la décharge de xénon.

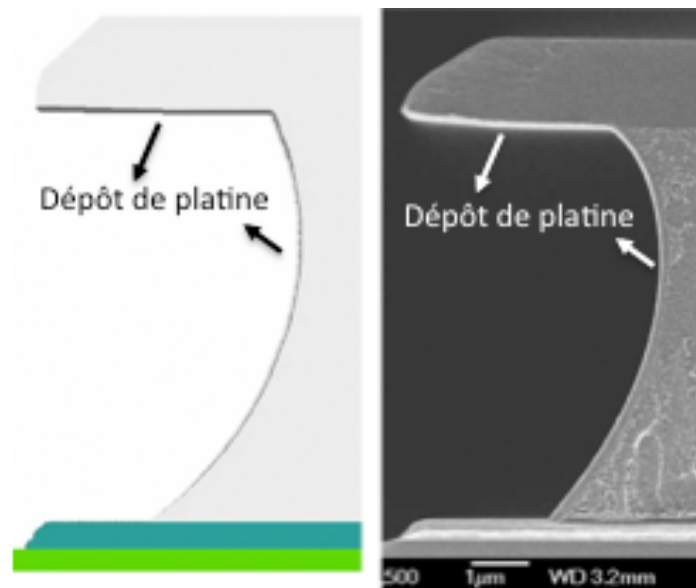


Figure 57. Comparaison entre la simulation et les données du profil de gravure d'un motif en T inversé par pulvérisation dans un plasma d'argon à une pression de 1 mTorr et avec une tension de 125 V.

Puisque la fonction de distribution en énergie des particules pulvérisées est similaire dans l'argon et le xénon (fig. 50), les paramètres de dépôt mentionnés dans la section 4.1 ont été conservés. Par contre, une différence notable pour le xénon est la présence d'une couche plus importante sur les parois intérieures de la cavité. Cette différence provient de la dispersion de la distribution angulaire des ions incidents qui est plus importante dans une décharge de xénon que dans l'argon.

Bien qu'aucune donnée n'ait été trouvée dans la littérature pour estimer la différence entre les deux gaz, l'explication physique provient du fait qu'à même pression le libre parcours moyen dans le xénon est plus court que dans une décharge d'argon puisque le rayon atomique du xénon est supérieur. La probabilité de collision dans la gaine du plasma est donc supérieure pour les ions de xénon, ce qui occasionne un élargissement de la distribution angulaire. Les ions frappant en moyenne la surface avec un angle d'incidence plus grand engendrent également une distribution angulaire des espèces pulvérisées plus large (réflexion spéculaire), c'est-à-dire ayant un angle plus important par rapport à la normale de la surface. Pour obtenir un accord entre les profils simulés et expérimentaux, la largeur à mi-hauteur de la distribution angulaire des ions incidents a donc dû être augmentée à 10° . En somme, dans tous les cas basse pression, le simulateur permet de décrire de façon excellente l'évolution temporelle du profil de gravure.

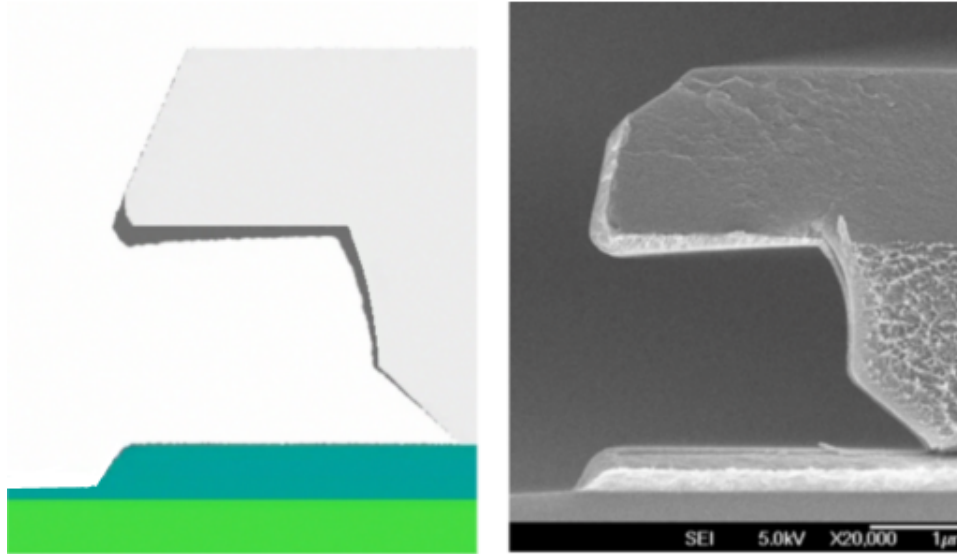


Figure 58. Comparaison entre la simulation et les données expérimentales du profil de gravure d'un motif en T inversé à cavité large par pulvérisation dans un plasma d'argon à une pression de 1 mTorr et avec une tension de 125 V.

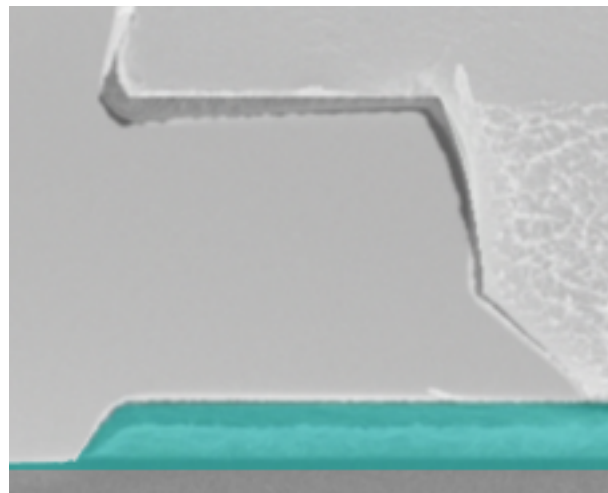


Figure 59. Superposition du profil simulé et du profil expérimental présentés dans la figure 58.

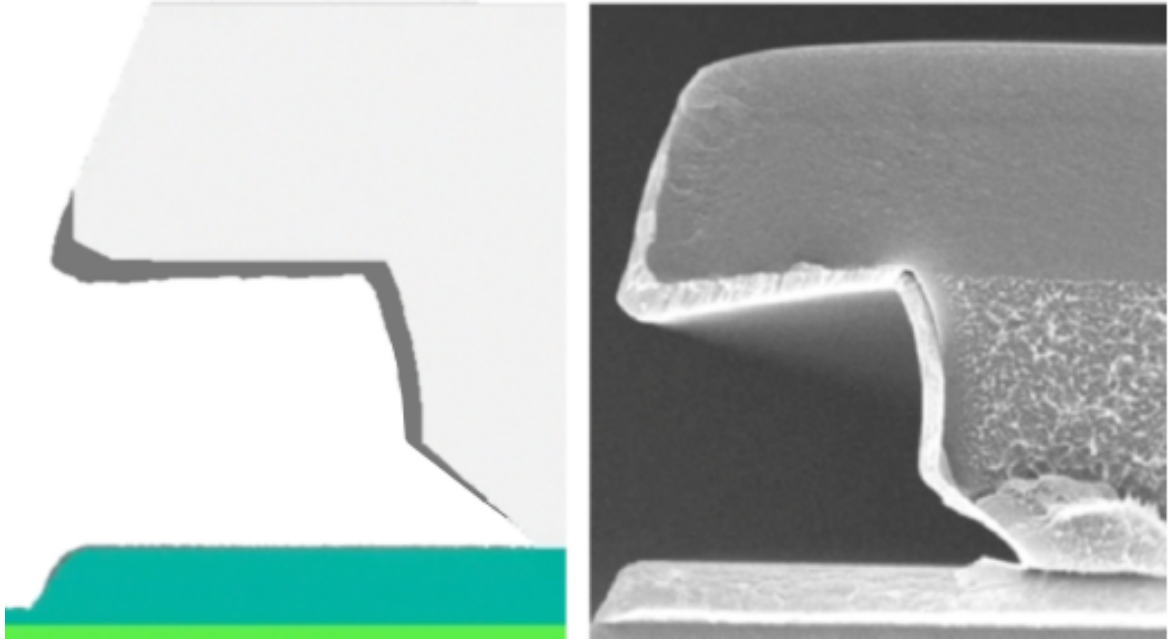


Figure 60. Comparaison entre la simulation et les données du profil de gravure d'un motif en T inversé à cavité large par pulvérisation dans un plasma de xénon à une pression de 1 mTorr et avec une tension de polarisation de 100 V.

4.2.2 Cas à haute pression

À haute pression, on observe la présence dans le bas du profil d'une mince couche de platine. Par le passé, plusieurs hypothèses furent émises quant au phénomène physique responsable de cette couche. On a tout d'abord pensé qu'elle était le fruit d'une ionisation rapide des espèces pulvérisées qui étaient réaccélérées vers le substrat par le champ de la gaine avant de se redéposer. On a également émis l'hypothèse que cette couche résultait de l'interaction avec une couche collisionnelle de Knudsen présente près du substrat. Dans le cas de ces deux hypothèses, la couche est beaucoup trop épaisse pour être expliquée par l'une ou l'autre d'entre elles. En effet, la faible pression de fonctionnement de la décharge engendre un libre parcours moyen trop grand pour que les phénomènes collisionnels mentionnés précédemment soient importants. Un indice significatif quant à l'explication du phénomène a été tiré d'un article [165] présentant des résultats de simulation de gravure du cuivre à l'échelle du réacteur.

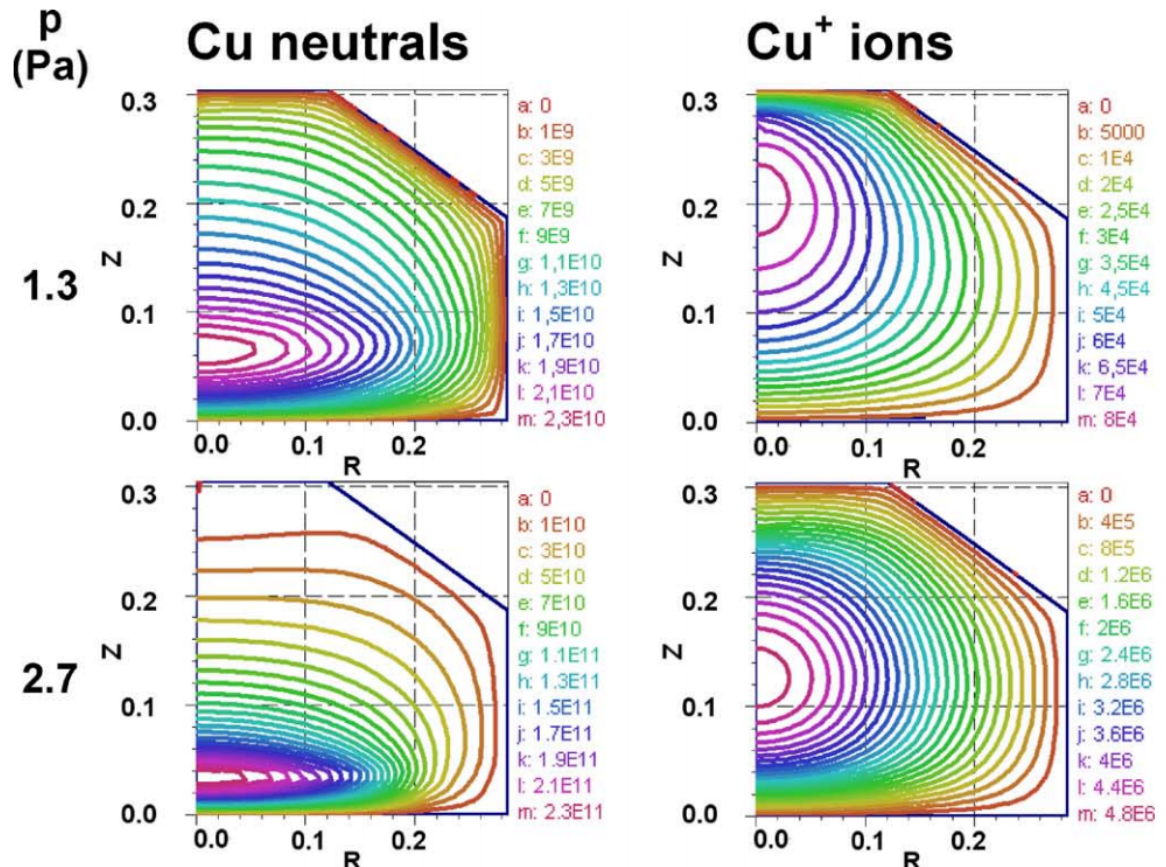


Figure 61. Dépendance de la pression sur le profil de densité de cuivre neutre et ionisé produit par pulvérisation dans une décharge d'argon [165].

Dans cet article, l'auteur démontre qu'avec l'augmentation de la pression, la distance de pénétration des espèces pulvérisées dans la chambre diminue exponentiellement (fig. 61), ce qui implique que le redépôt par rétrodiffusion augmente également de façon exponentielle en fonction de la pression. Tel que mentionné dans la section 3.2.6.3, ce flux d'atomes rétrodiffusés est composé en grande majorité d'espèces neutres thermiques. Notons également qu'une partie du flux rétrodiffusé frappe le haut du masque de gravure et se dépose ou retourne vers la phase gazeuse en étant réfléchi. Les atomes se déposant ainsi sont rapidement pulvérisés par le flux d'ions incidents et retournent ensuite vers la phase gazeuse où ils ont encore une probabilité d'être rétrodiffusés vers le motif. La figure 62 présente des résultats de simulation respectivement pour l'argon et le xénon à une pression de 30 mTorr. L'augmentation de la pression causant également un élargissement

de la fonction de distribution angulaire des ions incidents, les largeurs à mi-hauteur de ces distributions furent évaluées respectivement à 10° et 14° pour l'argon et le xénon. La différence la plus notable entre les deux profils est l'épaisseur plus importante de la couche déposée dans le bas du profil. Pour l'argon, le degré de rétrodiffusion permettant un accord avec les données de laboratoire est de 0.9, ce qui concorde avec les données de Stafford et al. [42]. Dans le cas du xénon, puisque nous ne détenons pas de valeur expérimentale, nous avons évalué qu'un degré de rétrodiffusion de 0.95 était nécessaire pour faire concorder les simulations aux données. Puisque la distance de thermalisation est directement proportionnelle au libre parcours moyen [165], alors, à pression égale, il est raisonnable de supposer que le degré de rétrodiffusion est plus élevé dans le cas du xénon.

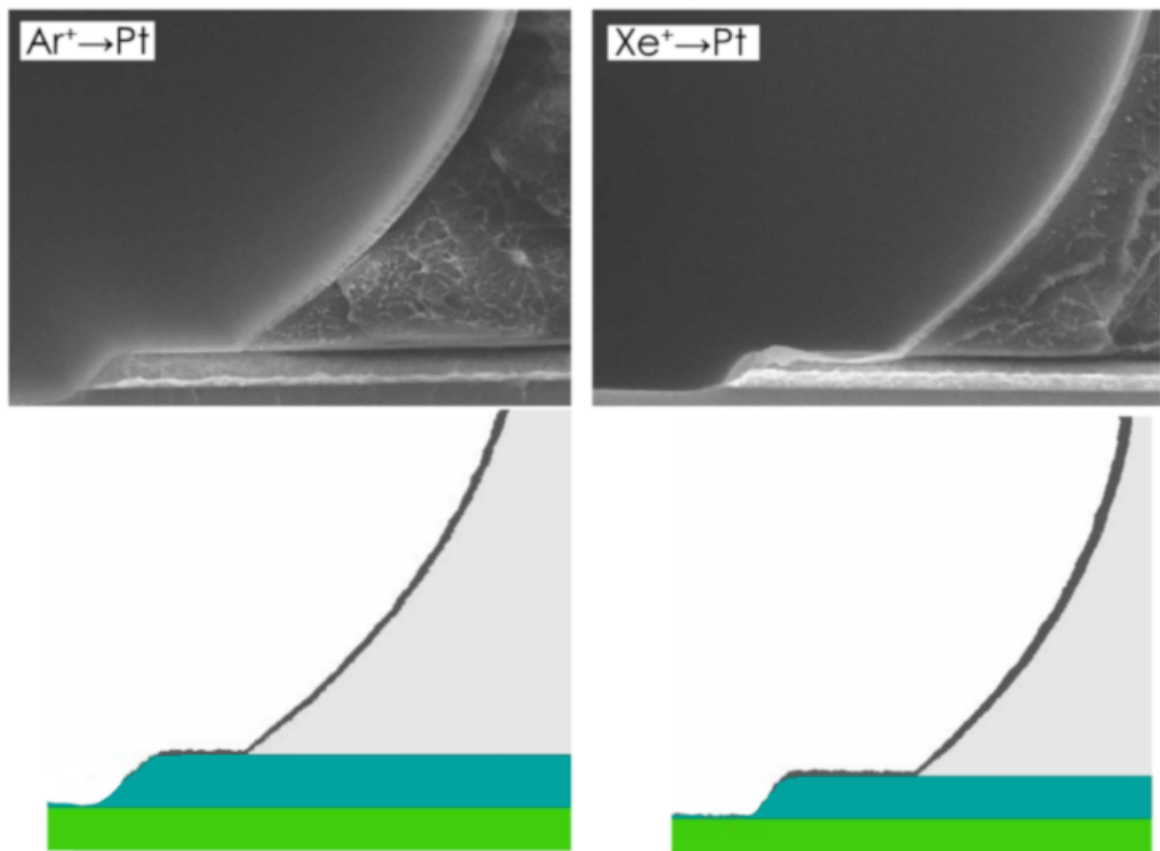


Figure 62. Comparaison entre la simulation et les données du profil de gravure d'un motif en T inversé par pulvérisation dans un plasma d'argon et de xénon à une pression de 30 mTorr et avec une tension de polarisation de 100 V et 125 V respectivement.

Dans les deux cas, la couche déposée dans le bas du profil semble être d'épaisseur pratiquement homogène. Ceci est dû au fait que la largeur de la cavité est trop faible pour que le flux déposé dans le bas du profil soit affecté de façon importante par l'ombrage causé par la paroi supérieure du motif. Puisque l'ouverture est centrée, on s'attend à obtenir un flux rétrodiffusé plus important sur le bord de la tranchée que par rapport au coin de la jonction avec le masque de gravure puisque le point plus près du centre soutend un angle solide plus grand avec la phase gazeuse (fig. 63, $\theta_1 > \theta_2$).

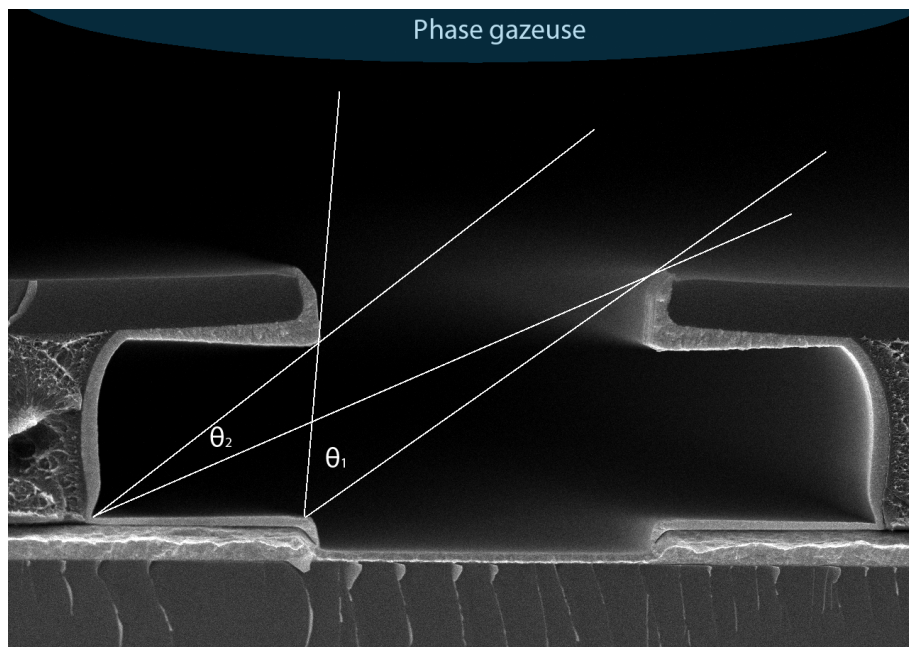


Figure 63. Schéma de l'effet d'ombrage des particules neutres par la paroi supérieure de la cavité.

Pour vérifier ce phénomène, nous avons simulé un motif ayant une cavité plus large pour lequel l'effet d'ombrage est plus facilement observable. On observe sur la figure 64 que cet effet d'ombrage est bel et bien présent, l'épaisseur du platine déposé près de la tranchée étant plus importante et décroissant de façon monotone vers le coin où le flux d'atomes rétrodiffusés est le plus faible.

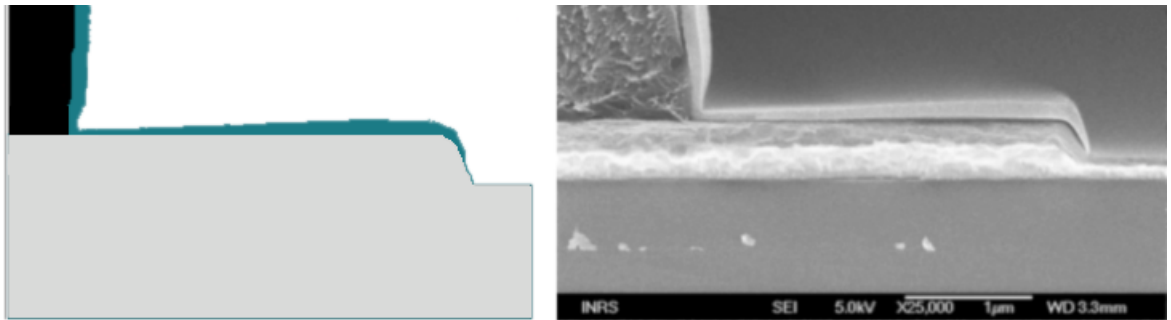


Figure 64. Comparaison entre la simulation et les données du profil de gravure d'un motif en T inversé à cavité large par pulvérisation dans un plasma d'argon à une pression de 30 mTorr et sous une tension de polarisation de 125 V.

Pour conclure cette section sur les profils en T inversé, notons que la largeur de la tranchée est déterminante quant à l'épaisseur du dépôt de rétrodiffusion. En effet, dans le cas des tranchées étroites, même à des pressions supérieures ou égales à 10 mTorr (fig. 65), on n'observe aucun dépôt, ou très peu, dans le bas du profil. L'explication provient du fait que pour les tranchées étroites, le flux d'atomes pulvérisés vers la phase gazeuse est beaucoup plus faible que pour les tranchées larges, la majorité des atomes pulvérisés frappant la paroi supérieure de la cavité.

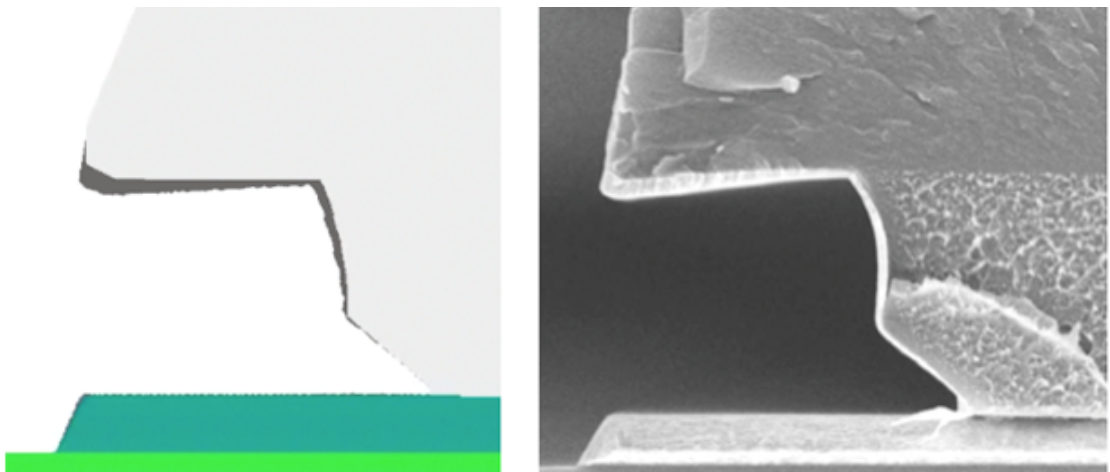


Figure 65. Comparaison entre la simulation et les données du profil de gravure d'un motif en T inversé à cavité large par pulvérisation dans un plasma de xénon à une pression de 10 mTorr et avec une tension de 125 V.

4.3 Dépôt physique du platine en phase vapeur

Le simulateur étant suffisamment général, la simulation de dépôt physique en phase vapeur est possible directement sans modification du code du simulateur. Pour simuler le dépôt de platine, il suffit d'entrer la distribution en énergie et en angles des particules neutres et ionisées de façon à générer le flux désiré vers la surface. En imposant une fonction de distribution en énergie en dessous du seuil de gravure de la surface, les particules interagiront donc avec la surface par le biais du coefficient de collage. Il est également possible de considérer différents flux. Par exemple pour le dépôt de vapeur partiellement ionisée, on génère à l'entrée du domaine de simulation à la fois un flux thermique et un flux d'ions selon leur fonction de distribution respective. On présente dans la figure 66, des résultats de simulation de remplissage par vapeur de platine de tranchées avec différents rapports d'aspect. Puisqu'on ne retrouve pas dans la littérature de données expérimentales obtenues avec un tel système, nous avons comparé ces simulations à des profils expérimentaux issus d'un système similaire, soit le dépôt de vapeur de cuivre [193]. On utilisera donc les mêmes paramètres que dans ce travail, c'est-à-dire un degré d'ionisation de 0.7 et une tension de polarisation de 5 V sur le substrat.

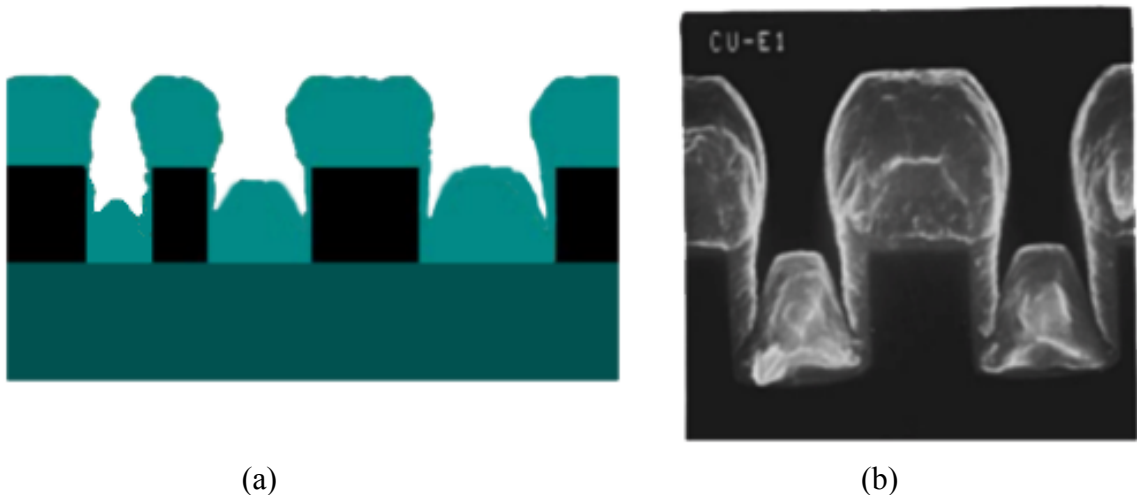


Figure 66. a) Simulation du remplissage de tranchées par vapeur de platine pour différents rapports d'aspects, b) Profils expérimentaux de remplissage de tranchée par vapeur métallique de cuivre [107].

Bien que la comparaison ne puisse être faite que de façon qualitative, l'allure des profils obtenus concorde très bien avec ce à quoi nous pouvions nous attendre pour un tel système. En particulier, on note l'important dépôt au-dessus du masque et qui s'élargit de façon à refermer la tranchée. Il en est de même pour le remplissage de la tranchée. En effet, le maximum de matière déposée se retrouve au centre où le flux est le plus important et diminue vers les côtés de la tranchée. L'augmentation du rapport d'aspect a pour effet de diminuer la couverture de marche du fond de la tranchée. Plus le rapport d'aspect est grand, moins le flux thermique est important et l'ombrage causé par les structures déposées au-dessus du masque devient rapidement important. Un autre point de comparaison est le facettage similaire du dépôt sur le dessus du masque.

On compare ensuite les résultats du remplissage de tranchée assisté par un flux d'ions d'argon à 125 eV, soit une énergie suffisamment élevée pour pulvériser la surface. Le flux d'ions incidents a pour effet de garder la tranchée ouverte et d'ainsi permettre un remplissage complet de la tranchée (fig. 67). La comparaison avec la simulation du remplissage de tranchées par du cuivre assisté par un flux d'argon réalisée avec un simulateur cellulaire donne des résultats similaires.



Figure 67. Comparaison entre a) la simulation du profil de dépôt de vapeur de platine assisté par bombardement ionique et b) résultats de simulation du dépôt de cuivre assisté par bombardement ionique [193].

Pour conclure, on présente la simulation du dépôt de platine par un faisceau d'ions de faible énergie à angle d'incidence de 75° par rapport à la surface. Dans ces conditions, on observe une microstructure colonnaire inclinée, mais plus verticale du côté d'où provient le flux incident (fig. 68). Ce phénomène a déjà été observé et des techniques faisant appel à un substrat rotatif ont été développés pour effectuer la croissance de nanofils ayant des propriétés mécaniques et optiques exceptionnelles.

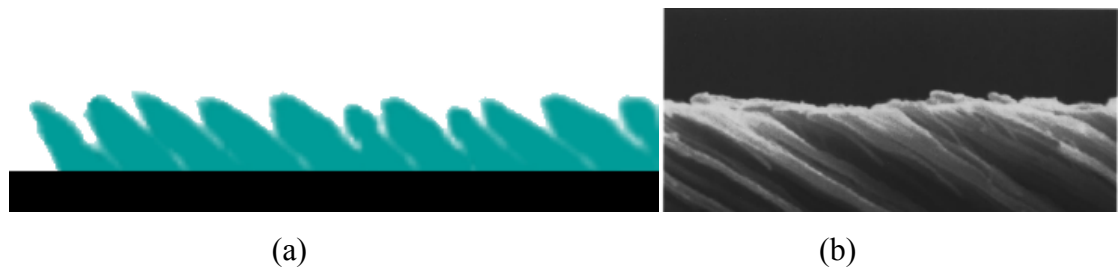


Figure 68. a) Simulation démontrant la microstructure colonnaire obtenue lors du dépôt de platine par faisceau d'ions de faible énergie à angle d'incidence de 75° . b) Dépôt effectué à un angle d'incidence de 85° résultant en une microstructure colonnaire inclinée [194].

CHAPITRE 5.

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Dans cet ouvrage, nous avons présenté les étapes importantes que j'ai dû traverser lors de la conception du simulateur de profil de gravure et de dépôt. L'applicabilité du modèle vise les procédés utilisant des sources plasma de haute densité à basse pression. Le simulateur se veut à la fois un outil intéressant pour l'étude fondamentale des mécanismes de gravure et de croissance de couches minces en plus de posséder un pouvoir prédictif pour guider la recherche en laboratoire. En particulier, les exigences de l'industrie de la microfabrication, quant à la réduction de la taille des motifs et au contrôle de l'uniformité des procédés, engendrent des dépenses astronomiques en recherche. Ultimement, le simulateur a comme but de remplacer les visites au laboratoire et devenir un outil d'optimisation des procédés. On pourrait ainsi réduire les dépenses liées à la recherche expérimentale, qui est souvent menée par le coûteux principe d'essai-erreur. Le simulateur est basé sur une approche cellulaire exploitant les méthodes « particle-in-cell » et Monte-Carlo. Le simulateur permet de reproduire l'évolution de la surface engendrée par la gravure par pulvérisation, la gravure réactive assistée, ou non, par bombardement ionique et par le dépôt d'atome menant à la croissance de couches minces.

Nous avons débuté en introduisant au premier chapitre, les principes fondamentaux de la microfabrication, en particulier pour les procédés à base de plasma de haute densité à basse pression. Nous avons brièvement présenté différents types de source plasma. Nous avons ensuite discuté des différents mécanismes physiques responsables de la gravure ainsi que les principaux enjeux associés. On s'est ensuite compendieusement intéressé aux techniques de gravure profonde tel que le procédé Bosch et la gravure cryogénique. Pour conclure le premier chapitre, nous avons examiné les principales anomalies causées par le transport non idéal des particules ioniques et réactives à l'intérieur des motifs.

Le deuxième chapitre a été consacré à l'introduction des méthodes de simulation particulaire/Monte-Carlo. Nous avons présenté, dans la limite du cas électrostatique, les relations nécessaires pour effectuer le transport des différentes espèces dans le domaine de simulation. La deuxième partie du chapitre se voulait une introduction aux méthodes Monte-Carlo. On y a présenté des méthodes pour générer des variables aléatoires distribuées selon des fonctions de densité de probabilités pour la simulation des processus stochastiques. En fin de chapitre, nous avons introduit les principes de la méthode Monte-Carlo cinétique pour la simulation de processus de surface.

Le troisième chapitre a présenté de façon globale l'implémentation des différents modèles de surface et de transports des particules. Les particules sont injectées aux frontières du domaine de simulation selon leur fonction de distribution respective en énergie et en angle. Dans le cas des ions, on tient compte de la fonction de distribution en énergie et de la dispersion angulaire lors de l'impact avec la surface. Le modèle du rendement de pulvérisation rend compte de la dépendance en énergie et en angle d'incidence de la particule incidente ainsi que de la composition locale de la surface (pour la pulvérisation réactive assistée par le bombardement ionique) ainsi que de la probabilité de réflexion. Pour ce qui est du transport des espèces réactives, on considère un calcul de flux tenant compte du phénomène d'ombrage par le motif ainsi que de la probabilité de réémission. Les processus chimiques de surfaces sont modélisés par la cinétique de Langmuir avec laquelle on obtient le degré de recouvrement et la vitesse de gravure locale. Le simulateur permet également de reproduire le dépôt de couche mince en adaptant les paramètres de croissance selon l'énergie d'incidence des particules déposées et ceux du modèle de diffusion de surface basé sur la méthode Monte-Carlo cinétique.

Nous avons démontré la fiabilité du simulateur en traitant le cas de la gravure de platine par plasma d'argon de haute densité. Premièrement, nous avons simulé la gravure de tranchée en tenant compte de l'effet de la dispersion angulaire des ions incidents, de la

dépendance angulaire du rendement de pulvérisation et de la probabilité de réflexion sur les parois. Le transport des particules pulvérisées tient compte de la probabilité de réémission ou de dépôt sur les surfaces. On a ainsi pu reproduire de façon précise les résultats expérimentaux de la gravure de tranchée de différentes largeurs. Dans tous les cas, on a pu retrouver l'effet de microtranchée, de l'inclinaison des parois et du redépôt sur le masque de gravure. En particulier, dans le cas d'une tranchée de $0.5 \mu\text{m}$, nous avons reproduit la forme en V du profil de gravure. Cette forme est causée par l'effet de focalisation de la microtranchée par la réflexion des ions sur les parois de part et d'autre de la tranchée.

Nous avons ensuite simulé la gravure de profils en «T inversé» dans un réacteur à couplage inductif. À basse pression, autant pour des décharges d'argon que de xénon le simulateur s'est montré précis pour décrire la gravure de la tranchée ainsi que la croissance de couches minces de platine causée par le dépôt des espèces pulvérisées sur les parois de la cavité. À haute pression, on a mis en évidence le phénomène de redépôt par rétrodiffusion des espèces pulvérisées en étudiant la présence de dépôt de couche mince dans le bas des cavités.

Finalement, nous avons simulé le dépôt physique de vapeur ionisée de platine pour le remplissage de tranchée. En comparant les résultats avec des données expérimentales de dépôt de cuivre dans des conditions semblables, nous avons observé des comportements similaires. La dispersion angulaire des particules incidentes engendre une non-uniformité du remplissage dépendante du rapport d'aspect. On a également démontré que l'assistance du dépôt par un bombardement ionique énergétique mène à un meilleur remplissage de tranchée, l'effet du bombardement ayant comme résultat de maintenir la tranchée ouverte et d'empêcher la formation de cavité.

Bien que le simulateur se soit montré efficace pour décrire la pulvérisation du platine, dans sa forme actuelle, plusieurs limitations se trouvent imposées par les modèles utilisés. Par exemple, pour calculer le rendement de pulvérisation nous avons utilisé des relations analytiques semi-empiriques qui nécessitent l'ajustement de paramètres à l'aide de données expérimentales. L'intégration d'un modèle de collision binaire, similaire à SRIM, pour traiter l'interaction des ions avec la surface, apporterait une amélioration notable. Cette simulation permettrait de générer à la fois le rendement de pulvérisation et les fonctions de distributions des espèces pulvérisées tout en rendant compte du phénomène de réflexion à angle d'incidence rasante. De plus, ce type de simulation prenant en compte la distance de pénétration des ions incidents, il serait possible de rendre compte de l'évolution de la densité d'implantation ionique lors de la simulation de profils.

Une autre limitation du simulateur provient du modèle statique d'insertion des particules dans le domaine de simulation. Les flux sont générés à l'aide d'approximations analytiques ou de données expérimentales, ce qui ne permet pas de rendre compte du changement des conditions opératoires induit par les produits de gravure. Le couplage avec un simulateur à l'échelle de la décharge de type «particle-in-cell» incluant un modèle de gaine, permettrait de rendre compte de façon dynamique le flux de chacune des espèces, en particulier des fonctions de distributions angulaires et en énergie des ions près de la surface. Concluons en mentionnant que l'implémentation des améliorations proposées n'est pas triviale puisqu'elle implique le couplage de simulations à différentes échelles dimensionnelles et temporelles.

BIBLIOGRAPHIE

1. Moore, G.E., *Cramming more components onto integrated circuits*. Proceedings of the IEEE, 1998. **86**(1): p. 82-85.
2. Warnock, J. *Circuit design challenges at the 14nm technology node*. 2011. IEEE.
3. Wang, C., et al., *Radio Frequency and Linearity Performance of Transistors Using High-Purity Semiconducting Carbon Nanotubes*. ACS nano, 2011.
4. Park, S.H., et al., *Performance Comparisons of III-V and Strained-Si in Planar FETs and Nonplanar FinFETs at Ultrashort Gate Length (12 nm)*. Electron Devices, IEEE Transactions on, 2012. **59**(8): p. 2107-2114.
5. Colinge, J.P., *FinFETs and other multi-gate transistors*, 2008: Springer Verlag.
6. LaPedus, M. *Fabless-Foundry Model Under Stress*. 2012; Available from: <http://semimd.com/blog/2012/06/26/fabless-foundry-model-under-stress/>.
7. Hsu, T.R., *MEMS and microsystems: design, manufacture, and nanoscale engineering*2008: Wiley.
8. Keating, M., et al., *Low power methodology manual: for system-on-chip design*2007: Springer Publishing Company, Incorporated.
9. Yu, W., et al., *Review and comparison of nanofluid thermal conductivity and heat transfer enhancements*. Heat Transfer Engineering, 2008. **29**(5): p. 432-460.
10. Kilby, J.S.C., *Turning potential into realities: The invention of the integrated circuit (Nobel lecture)*. ChemPhysChem, 2001. **2**(8-9): p. 482-489.
11. Jorgenson, D.W., *Information technology and the US economy*. The American Economic Review, 2001. **91**(1): p. 1-32.
12. Chipworks. *The New iPad: A Closer Look Inside*. 2012; Available from: <http://www.chipworks.com/en/technical-competitive-analysis/resources/recent-teardowns/2012/03/the-new-ipad-a-closer-look-inside/>.
13. Forget, L.E., R.A. Gdula, and J.C. Hollis, *Selective reactive ion etching of polysilicon against SiO₂ utilizing SF₆-Cl₂-inert gas etchant*, 1980, Google Patents.
14. Palacios, T., *Applied physics: Nanowire electronics comes of age*. Nature, 2012. **481**(7380): p. 152-153.
15. Mahan, J.E., *Physical vapor deposition of thin films*. Physical Vapor Deposition of Thin Films, by John E. Mahan, pp. 336. ISBN 0-471-33001-9. Wiley-VCH, January 2000., 2000. **1**.
16. Park, J.H. and T. Sudarshan, *Chemical vapor deposition*. Vol. 2. 2001: Asm Intl.
17. Hopwood, J.A., *Ionized physical vapor deposition*. Vol. 27. 1999: Academic Pr.
18. Lucovsky, G., et al., *Deposition of silicon dioxide and silicon nitride by remote plasma enhanced chemical vapor deposition*. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 1986. **4**(3): p. 681-688.

19. Guo, L., et al., *High rate deposition of microcrystalline silicon using conventional plasma-enhanced chemical vapor deposition*. Japanese journal of applied physics, 1998. **37**: p. L1116-L1118.
20. Downey, S.W. and A. Yen, *Deep sub-micron metal etch with in-situ hard mask etch*, 2001, Google Patents.
21. Franssila, S., *Introduction to microfabrication* 2004: Wiley Online Library.
22. Makino, E. and T. Shibata, *FUNDAMENTALS OF MICROFABRICATION*. Ceramics Japan, 2001. **36**(3): p. 124-127.
23. Jackson, M.J., *Microfabrication and nanomanufacturing* 2006: CRC.
24. Percy, P.S., *The drive to miniaturization*. Nature, 2000. **406**(6799): p. 1023-1026.
25. Marchack, N. and J.P. Chang, *Perspectives in nanoscale plasma etching: what are the ultimate limits?* Journal of Physics D: Applied Physics, 2011. **44**(17): p. 174011-174011.
26. Stafford, L., *Etude fondamentale des mecanismes de gravure par plasma de materiaux de pointe: Application a la fabrication de dispositifs photoniques*, 2006, Universite de Montreal (Canada): Canada. p. 214 p.
27. Lieberman, M.A. and R.A. Gottscho, *Design of high-density plasma sources for materials processing*. Physics of Thin Films, 1994. **18**: p. 1-119.
28. Yokoyama, S., et al., *High-temperature etching of PZT/Pt/TiN structure by high-density ECR plasma*. Japanese journal of applied physics, 1995. **34**(part 1): p. 767-770.
29. Samukawa, S., Y. Suzuki, and M. Sasaki, *Extremely high-selective electron cyclotron resonance plasma etching for phosphorus-doped polycrystalline silicon*. Applied Physics Letters, 1990. **57**(4): p. 403-405.
30. Pearton, S., C. Abernathy, and F. Ren, *Low bias electron cyclotron resonance plasma etching of GaN, AlN, and InN*. Applied Physics Letters, 1994. **64**(17): p. 2294-2296.
31. Chen, F.F., *Physics of helicon discharges*. Physics of Plasmas, 1996. **3**: p. 1783.
32. Chen, F.F., *Experiments on helicon plasma sources*. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 1992. **10**(4): p. 1389-1401.
33. Charles, C. and R. Boswell, *Current-free double-layer formation in a high-density helicon discharge*. Applied Physics Letters, 2003. **82**(9): p. 1356-1358.
34. Jiwari, N., et al., *Al etching characteristics employing helicon wave plasma*. Japanese journal of applied physics, 1993. **32**(part 1): p. 3019-3022.
35. Kitagawa, H., et al., *Etching characteristics in helicon wave plasma*. Plasma Sources Science and Technology, 1993. **2**: p. 11.
36. You, I.K., et al., *Etching Mechanism of Ferroelectric Film Etched by Helicon Plasma Method*. Integrated Ferroelectrics, 2002. **48**(1): p. 213-220.
37. Li, W., et al., *Deep dry-etch of silica in a helicon plasma etcher for optical waveguide fabrication*. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 2005. **23**: p. 146.

38. Wernick, S. and R. Pinner, *The Surface Treatment and Finishing of Aluminum and Its Alloys. Vol. 1-2*. Robert Draper Ltd., Teddington, Middx. 1972, 1274 p(Book). 1972.
39. Bérubé, P.M., et al., *Correlation between surface chemistry and ion energy dependence of the etch yield in multicomponent oxides etching*. Journal of Applied Physics, 2009. **106**(6): p. 063302-063302-5.
40. Efremov, A.M., D.P. Kim, and C.I. Kim, *Simple model for ion-assisted etching using Cl₂--Ar inductively coupled plasma: effect of gas mixing ratio*. Plasma Science, IEEE Transactions on, 2004. **32**(3): p. 1344-1351.
41. Keller, A., S. Facsko, and W. Möller, *The morphology of amorphous SiO₂ surfaces during low energy ion sputtering*. Journal of Physics: Condensed Matter, 2009. **21**: p. 495305.
42. Stafford, L., et al., *Influence of redeposition on the plasma etching dynamics*. Journal of Applied Physics, 2007. **101**(8): p. 083303-083303.
43. Winters, H.F. and F.A. Houle, *Gaseous products from the reaction of XeF₂ with silicon*. J. Appl. Phys., 1983. **54**(3): p. 1218.
44. Min, J.-H., et al., *Redeposition of etch products on sidewalls during SiO₂ etching in a fluorocarbon plasma. II. Effects of source power and bias voltage in a CF₄ plasma*. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, 2003. **21**(4): p. 1203-1203.
45. Kim, S.H., et al., *Chemical Reaction During Pt Etching with SF₆ /Ar and Cl₂ /Ar Plasma Chemistries*. Japanese Journal of Applied Physics, 2003. **42**(Part 1, No. 4A): p. 1581-1585.
46. Coburn, J.W., H.F. Winters, and T.J. Chuang, *Ion-surface interactions in plasma etching*. Journal of Applied Physics, 1977. **48**(8): p. 3532-3532.
47. Wang, D.S., et al. *Research on Influence of Ion-Assisted Deposition to the Optical and Mechanical Properties of SiO₂ Film*. 2010. Trans Tech Publ.
48. Wadley, H.N.G., et al., *Mechanisms, models and methods of vapor deposition*. Progress in Materials Science, 2001. **46**: p. 329-377.
49. Balaji, S., et al., *Influence of secondary ion bombardment on the composition, structure and surface properties of platinum thin films*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2004. **217**(3): p. 423-428.
50. Chu, P.K., et al., *Plasma immersion ion implantation--a fledgling technique for semiconductor processing*. Materials Science and Engineering: R: Reports, 1996. **17**(6-7): p. 207-280.
51. Hershkowitz, N., et al., *Does high density--low pressure etching depend on the type of plasma source?* Physics of Plasmas, 1996. **3**(5): p. 2197-2202.
52. Frey, L., C. Lehrer, and H. Ryssel, *Nanoscale effects in focused ion beam processing*. Applied Physics A: Materials Science & Processing, 2003. **76**(7): p. 1017-1023.
53. Langford, R.M., et al., *Focused Ion Beam Micro- and Nanoengineering*. MRS Bulletin, 2007. **32**(May): p. 417-423.

54. Kim, H.-B., et al., *Simulation of ion beam induced micro/nano fabrication*. Journal of Micromechanics and Microengineering, 2007. **17**(6): p. 1178-1183.
55. Koch, J., et al. *Creation of nanoelectronic devices by focussed ion beam implantation*. 1999. IEEE.
56. Pochon, S. and D. Pearson, *Ion Beam Deposition*, 2010, Oxford instruments Plasma Technology, Oxford.
57. Tsai, W., et al., *High selectivity plasma etching of silicon dioxide with a dual frequency 27/2 MHz capacitive radio frequency discharge*. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, 1996. **14**(5): p. 3276-3282.
58. Levasseur, O., et al., *Deposition of Hydrophobic Functional Groups on Wood Surfaces Using Atmospheric-Pressure Dielectric Barrier Discharge in Helium-Hexamethyldisiloxane Gas Mixtures*. Plasma Processes and Polymers, 2012.
59. Narendra, J., et al. *Surface wave microplasma for localized etching*. 2008. IEEE.
60. Sugai, H., I. Ghanashev, and M. Nagatsu, *High-density flat plasma production based on surface waves*. Plasma Sources Science and Technology, 1998. **7**: p. 192.
61. Акимото, Т., et al., *Oxide etching using surface wave coupled plasma*. Jpn. J. Appl. Phys. Vol, 1994. **33**: p. 7037-7041.
62. Park, J., et al., *Gas breakdown in an atmospheric pressure radio-frequency capacitive plasma source*. Journal of Applied Physics, 2001. **89**: p. 15.
63. Coburn, J. and H.F. Winters, *Plasma etching—A discussion of mechanisms*. Journal of Vacuum Science and Technology, 1979. **16**(2): p. 391-403.
64. Eckstein, W., *Sputtering Yields*, in *Sputtering by Particle Bombardment*, 2007, Springer Berlin / Heidelberg. p. 33-187.
65. van Ballegooijen, E.C., *Simultaneous mass and temperature determination using a single quartz wafer: An optimized crystal cut*. Journal of Applied Physics, 1979. **50**(1): p. 91-101.
66. Sigmund, P., *Theory of sputtering. I. Sputtering yield of amorphous and polycrystalline targets*. Physical Review, 1969. **184**(2): p. 383.
67. Matsunami, N., et al., *A semiempirical formula for the energy dependence of the sputtering yield*. Radiation Effects Letters, 1980. **57**(1-2): p. 15-21.
68. Zhang, Z.L. and L. Zhang, *Anisotropic angular distribution of sputtered atoms*. Radiation Effects and Defects in Solids, 2004. **159**(5): p. 301-307.
69. Zhang, L. and Z. Zhang, *Anisotropic energy distribution of sputtered atoms induced by low energy heavy ion bombardment*. Radiation Effects and Defects in Solids, 2005. **160**(8): p. 337-347.
70. Howard, B. and C. Steinbruchel, *Reactive ion etching of copper in SiCl₄-based plasmas*. Applied physics letters, 1991. **59**(8): p. 914-916.
71. I.W, R., *Reactive ion etching for high aspect ratio silicon micromachining*. Surface and Coatings Technology, 1997. **97**(1-3): p. 140-150.
72. Kim, H.K., et al., *Inductively coupled plasma reactive ion etching of ZnO using BCl₃-based plasmas*. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, 2003. **21**(4): p. 1273.

73. Adesida, I., et al., *Reactive ion etching of gallium nitride in silicon tetrachloride plasma*. Applied physics letters, 1993. **63**(20): p. 2777-2779.
74. Yoshikawa, T., et al., *Chlorine-based smooth reactive ion beam etching of indium-containing III-V compound semiconductor*. Japanese Journal of Applied Physics, 1992. **31**(part 1): p. 4381-4386.
75. Coburn, J. and H.F. Winters, *Ion- and electron-assisted gas-surface chemistry—An important effect in plasma etching*. Journal of Applied Physics, 1979. **50**(5): p. 3189-3196.
76. Lieberman, M.A., *The Langmuir isotherm and the standard model of ion-assisted etching*. Plasma Sources Science and Technology, 2009. **18**(1): p. 014002.
77. Oostra, D.J., et al., *Ion-assisted etching of silicon by SF₆*. J. Appl. Phys., 1985. **46**(12): p. 1166.
78. Belen, R.J., et al., *In situ measurement of the ion incidence angle dependence of the ion-enhanced etching yield in plasma reactors*. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 2006. **24**(6): p. 2176.
79. Levinson, J.A. and E.S.G. Shaqfeh, *Ion-assisted etching and profile development of silicon in molecular chlorine*. 1997. **15**(4): p. 1902-1912.
80. Michael A. Lieberman, A.J.L., *Principles of plasma discharges and materials processing* 2005: John Wiley and Sons.
81. Gorla, C., et al., *Structural, optical, and surface acoustic wave properties of epitaxial ZnO films grown on (0112) sapphire by metalorganic chemical vapor deposition*. Journal of Applied Physics, 1999. **85**: p. 2595.
82. Meyerson, B., *Low-temperature silicon epitaxy by ultrahigh vacuum/chemical vapor deposition*. Applied Physics Letters, 1986. **48**(12): p. 797-799.
83. Yugo, S., et al., *Generation of diamond nuclei by electric field in plasma chemical vapor deposition*. Applied Physics Letters, 1991. **58**(10): p. 1036-1038.
84. Balasubramanian, K. and M. Burghard, *Chemically functionalized carbon nanotubes*. Small, 2005. **1**(2): p. 180-192.
85. Hampden-Smith, M.J. and T.T. Kodas, *Chemical vapor deposition of metals: Part I. An overview of CVD processes*. Chemical Vapor Deposition, 1995. **1**(1): p. 8-23.
86. Lu, T.J., et al., *Distributed porosity as a control parameter for oxide thermal barriers made by physical vapor deposition*. Journal of the American Ceramic Society, 2001. **84**(12): p. 2937-2946.
87. Lyu, S.C., et al., *Low-temperature growth of ZnO nanowire array by a simple physical vapor-deposition method*. Chemistry of materials, 2003. **15**(17): p. 3294-3299.
88. Narayan, J., et al., *Epitaxial growth of TiN films on (100) silicon substrates by laser physical vapor deposition*. Applied Physics Letters, 1992. **61**(11): p. 1290-1292.
89. Helmersson, U., et al., *Ionized physical vapor deposition (IPVD): A review of technology and applications*. Thin Solid Films, 2006. **513**(1): p. 1-24.
90. Vossen, J.L. and W. Kern, *Thin film processes II*. Vol. 2. 1991: Academic Pr.

91. Chang, C., et al., *Etching submicrometer trenches by using the Bosch process and its application to the fabrication of antireflection structures*. Journal of Micromechanics and Microengineering, 2005. **15**: p. 580.
92. Marty, F., et al., *Advanced etching of silicon based on deep reactive ion etching for silicon high aspect ratio microstructures and three-dimensional micro-and nanostructures*. Microelectronics journal, 2005. **36**(7): p. 673-677.
93. Mehregany, M. and C.A. Zorman, *SiC MEMS: opportunities and challenges for applications in harsh environments*. Thin Solid Films, 1999. **355**: p. 518-524.
94. Koehler, D.R., *Double resonator cantilever accelerometer*, 1984, Google Patents.
95. Du, L., Z. Zhao, and C. Pang. *Design and Fabrication MEMS-Based Micro Solid State cantilever Wind Speed Sensor*. 2007. IEEE.
96. Volland, B.E., *Profile simulations of gas chopping etching processes*, in *Institute of Physics 2004*, University of Kassel: Germany.
97. Dussart, R., et al., *The passivation layer formation in the cryo-etching plasma process*. Microelectronic engineering, 2007. **84**(5-8): p. 1128-1131.
98. Delprat, S., M. Chaker, and J. Margot, *Investigation of the gas pressure influence on patterned platinum etching characteristics using a high-density plasma*. Journal of Applied Physics, 2001. **89**: p. 29.
99. Rangelow, I.W. *Critical tasks in high aspect ratio silicon dry etching for microelectromechanical systems*. 2003. Denver, Colorado (USA): AVS.
100. Mindell, D.A., *Digital Apollo: human and machine in spaceflight* 2008: Mit Pr.
101. Gottscho, R.A., *Ion transport anisotropy in low pressure, high density plasmas*. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, 1993. **11**(5): p. 1884-1889.
102. Woodworth, J.R., et al., *Ion energy and angular distributions in inductively driven radio frequency discharges in chlorine*. Journal of Applied Physics, 1997. **81**(9): p. 5950-5959.
103. Manenschijn, A. and W.J. Goedheer, *Angular ion and neutral energy distribution in a collisional rf sheath*. Journal of Applied Physics, 1991. **69**(5): p. 2923-2930.
104. Ohtake, H., et al., *Prediction of Abnormal Etching Profile in High-Aspect-Ratio Via/Hole Etching Using On-Wafer Monitoring System*. Japanese Journal of Applied Physics, 2010. **49**(4): p. 04DB14.
105. Lai, S.L., D. Johnson, and R. Westerman, *Aspect ratio dependent etching lag reduction in deep silicon*. Vacuum, 2006(October 2005): p. 1283-1288.
106. Hamaguchi, S. and S.M. Rossnagel, *Simulations of trench-filling profiles under ionized magnetron sputter metal deposition*. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, 1995. **13**(2): p. 183-191.
107. Cheng, P.F., S.M. Rossnagel, and D.N. Ruzic, *Directional deposition of Cu into semiconductor trench structures using ionized magnetron sputtering*. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, 1995. **13**(2): p. 203-208.
108. Li, J., McVittie, J. P., et al., *Profile Simulation Studies of Oxide Deposition*

- from Ozone/TEOS*. Proc. 3rd Symp. Silicon Nitride and Silicon Dioxide Thin Insulation Films, 1994. ECS p. 94-16:570–580.
109. Cho, J., et al., *A kinetic Monte Carlo simulation of film growth by physical vapor deposition on rotating substrates*. Materials Science and Engineering A, 2005. **391**: p. 390-401.
 110. Lafleur, T. and R. Boswell, *Particle-in-cell simulations of ambipolar and nonambipolar diffusion in magnetized plasmas*. Physics of Plasmas, 2012. **19**(5): p. 053505-053505-7.
 111. Zhao, S.X., et al., *The effect of F2 attachment by low-energy electrons on the electron behaviour in an Ar/CF4 inductively coupled plasma*. Plasma Sources Science and Technology, 2012. **21**: p. 025008.
 112. Wise, R.S., D.P. Lymberopoulos, and D.J. Economou, *Rapid two-dimensional self-consistent simulation of inductively coupled plasma and comparison with experimental data*. Applied Physics Letters, 1996. **68**(18): p. 2499-2501.
 113. Nanbu, K., T. Morimoto, and M. Suetani, *Direct simulation Monte Carlo analysis of flows and etch rate in an inductively coupled plasma reactor*. Plasma Science, IEEE Transactions on, 1999. **27**(5): p. 1379-1388.
 114. Turner, M., *Collisionless electron heating in an inductively coupled discharge*. Physical review letters, 1993. **71**(12): p. 1844-1847.
 115. Georgieva, V., A. Bogaerts, and R. Gijbels, *Particle-in-cell/Monte Carlo simulation of a capacitively coupled radio frequency Ar/CF4 discharge: Effect of gas composition*. Journal of Applied Physics, 2003. **93**(5): p. 2369-2379.
 116. Charbonneau, P., *Dynamo models of the solar cycle*. Living Reviews in Solar Physics, 2005. **2**: p. 2.
 117. Ridgers, C., et al., *Dense Electron-Positron Plasmas and Ultraintense γ rays from Laser-Irradiated Solids*. Physical review letters, 2012. **108**(16): p. 165006.
 118. Sang, C., J. Sun, and D. Wang, *Plasma density enhancement in atmospheric-pressure dielectric-barrier discharges by high-voltage nanosecond pulse in the pulse-on period: a PIC simulation*. Journal of Physics D: Applied Physics, 2010. **43**: p. 045202.
 119. Larsgård, N.M., *Parallelizing Particle-In-Cell Codes with OpenMP and MPI*. 2007(May).
 120. Dawson, J.M., *Particle simulation of plasmas*. Reviews of Modern Physics, 1983. **55**(2): p. 403-447.
 121. Birdsall, C.K., *Particle-in-cell charged-particle simulations, plus Monte Carlo collisions with neutral atoms, PIC-MCC*. IEEE Transactions on Plasma Science, 1991. **19**(2): p. 65-85.
 122. Nyquist, H., *Certain topics in telegraph transmission theory*. American Institute of Electrical Engineers, Transactions of the, 1928. **47**(2): p. 617-644.
 123. Hockney, R.W., *A fast direct solution of Poisson's equation using Fourier analysis*. Journal of the ACM (JACM), 1965. **12**(1): p. 95-113.
 124. Buneman, O., *COMPACT NON-ITERATIVE POISSON SOLVER*, 1969, Stanford Univ., Calif. Inst. for Plasma Research.

125. Shieh, A., *Fast Poisson solvers on general two dimensional regions for the Dirichlet problem*. Numerische Mathematik, 1978. **31**(4): p. 405-429.
126. Perrone, N. and R. Kao, *A general finite difference method for arbitrary meshes*. Computers & Structures, 1975. **5**(1): p. 45-57.
127. Liszka, T. and J. Orkisz, *The finite difference method at arbitrary irregular grids and its application in applied mechanics*. Computers & Structures, 1980. **11**(1-2): p. 83-95.
128. McAdams, A., E. Sifakis, and J. Teran. *A parallel multigrid Poisson solver for fluids simulation on large grids*. 2010. Eurographics Association.
129. Ricci, P., G. Lapenta, and J. Brackbill, *A simplified implicit Maxwell solver*. Journal of computational physics, 2002. **183**(1): p. 117-141.
130. Welch, D., et al., *Implementation of a non-iterative implicit electromagnetic field solver for dense plasma simulation*. Computer Physics Communications, 2004. **164**(1): p. 183-188.
131. Villasenor, J. and O. Buneman, *Rigorous charge conservation for local electromagnetic field solvers*. Computer Physics Communications, 1992. **69**(2): p. 306-316.
132. Studio, M., *CST-Computer Simulation Technology*. Bad Nuheimer Str, 2008. **19**: p. 64289.
133. Ansoft, H., *3-D electromagnetic Simulation Software*. Ansoft corp., Pittsburgh, PA, 2009.
134. Burger, S., et al. *JCMsuite: An adaptive FEM solver for precise simulations in nano-optics*. 2008. Optical Society of America.
135. Zimmerman, W.B.J., *Multiphysics modelling with finite element methods* 2006: World Scientific Singapore.
136. Hoffmann, J., et al., *Comparison of electromagnetic field solvers for the 3D analysis of plasmonic nano antennas*. Arxiv preprint arXiv:0907.3570, 2009.
137. James, F., *A review of pseudorandom number generators*. Computer Physics Communications, 1990. **60**(3): p. 329-344.
138. Flannery, B.P., et al., *Numerical recipes in C*. Press Syndicate of the University of Cambridge, New York, 1992.
139. Youssef, S., *Monte carlo techniques*. The European Physical Journal C, 2000. **15**(1-4): p. 202-204.
140. von Neumann, J., *Various Techniques used in Connection with Random Digits*. Applied Math Series 1951: National Bureau of Standards.
141. Abraham-Shrauner, B. and C.D. Wang, *Etching Profiles and Neutral Shadowing in Long Trenches*. Journal of The Electrochemical Society, 1996. **143**(2): p. 672-676.
142. Tuda, M., K. Nishikawa, and K. Ono, *Numerical study of the etch anisotropy in low-pressure, high-density plasma etching*. Journal of Applied Physics, 1997. **81**(2): p. 960.

143. Gnaedinger, J.R.J., *Some Calculations of the Thickness Distribution of Films Deposited from Large Area Sputtering Sources*. Journal of Vacuum Science and Technology, 1969. **6**(3): p. 355-362.
144. Stafford, L., et al. *Barium--strontium--titanate etching characteristics in chlorinated discharges*. 2003. Denver, Colorado (USA): AVS.
145. Janes, J. and C. Huth, *Energy resolved angular distribution of argon ions at the substrate plane of a radio frequency plasma reactor*. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 1992. **10**(6): p. 3522-3531.
146. Miller, P.A. and M.E. Riley, *Dynamics of collisionless rf plasma sheaths*. Journal of Applied Physics, 1997. **82**: p. 3689.
147. Kratzer, M., et al., *Hybrid model for the calculation of ion distribution functions behind a direct current or radio frequency driven plasma boundary sheath*. Journal of Applied Physics, 2001. **90**: p. 2169.
148. Kawamura, E., et al., *Ion energy distributions in rf sheaths; review, analysis and simulation*. Plasma Sources Science and Technology, 1999. **8**: p. R45.
149. Raja, L.L. and M. Linne, *Analytical model for ion angular distribution functions at rf biased surfaces with collisionless plasma sheaths*. Journal of Applied Physics, 2002. **92**: p. 7032.
150. Abraham, I.C., et al., *Ion energy distributions versus frequency and ion mass at the rf-biased electrode in an inductively driven discharge*. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 2002. **20**(5): p. 1759-1768.
151. Mizutani, N. and T. Hayashi, *Ion energy and angular distribution at the radio frequency biased electrode in an inductively coupled plasma apparatus*. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 2001. **19**(4): p. 1298-1298.
152. Pickering, H.W., *Ion sputtering of alloys*. Journal of Vacuum Science and Technology, 1976. **13**(2): p. 618-618.
153. Yamamura, Y., *Theory of sputtering and comparison to experimental data*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1982. **194**(1-3): p. 515-522.
154. Falcone, G., *Theory of collisional sputtering*. Surface Science, 1987. **187**(1): p. 212-222.
155. Eckstein, W., J. Bohdansky, and J. Roth, *Physical sputtering*. Nucl. Fusion, 1991. **1**: p. 51.
156. Ziegler, J.F., M. Ziegler, and J. Biersack, *SRIM—The stopping and range of ions in matter (2010)*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2010. **268**(11): p. 1818-1823.
157. Guo, W. and H.H. Sawin, *Modeling of the angular dependence of plasma etching*. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 2009. **27**(6): p. 1326-1336.
158. Stark, Y., et al., *Sputter yields of single- and polycrystalline metals for application in focused ion beam technology*. Journal of Applied Physics, 2009. **105**(1): p. 013542-5.

159. Rosandi, Y., et al., *Competition of terrace and step-edge sputtering under oblique-incidence ion impact on a stepped Pt (111) surface*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 2009. **267**(16): p. 2769-2773.
160. Chang, J.P. and H.H. Sawin. *Kinetic study of low energy ion-enhanced polysilicon etching using Cl, Cl₂, and Cl⁺ beam scattering*. 1997. Philadelphia, Pennsylvania (USA): AVS.
161. Arnold, J.C., D.C. Gray, and H.H. Sawin, *Influence of reactant transport on fluorine reactive ion etching of deep trenches in silicon*. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, 1993. **11**(6): p. 2071-2080.
162. Hoekstra, R.J., et al., *Microtrenching resulting from specular reflection during chlorine etching of silicon*. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, 1998. **16**(4): p. 2102-2104.
163. Vyvoda, M.A., et al., *Role of sidewall scattering in feature profile evolution during Cl₂ and HBr plasma etching of silicon*. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, 2000. **18**(2): p. 820-833.
164. Das Sarma, S. and P. Tamborenea, *A new universality class for kinetic growth: One-dimensional molecular-beam epitaxy*. Physical review letters, 1991. **66**(3): p. 325-328.
165. Brcka, J. and R.L. Robison, *Wafer Redeposition Impact on Etch Rate Uniformity in IPVD System*. IEEE Transactions on Plasma Science, 2007. **35**(1): p. 74-82.
166. Chopard, B. and M. Droz, *Cellular automata model for the diffusion equation*. Journal of Statistical Physics, 1991. **64**(3): p. 859-892.
167. Packard, N.H. and S. Wolfram, *Two-dimensional cellular automata*. Journal of Statistical Physics, 1985. **38**(5): p. 901-946.
168. Wolfram, S., *Cellular automata as models of complexity*. Nonlinear Physics for Beginners: Fractals, Chaos, Solitons, Pattern Formation, Cellular Automata, Complex Systems, 1998: p. 197-202.
169. Chopard, B., M. Droz, and C.U. Press, *Cellular automata modeling of physical systems*. Vol. 122. 1998: Cambridge University Press Cambridge.
170. Oldham, W., et al., *A general simulator for VLSI lithography and etching process: part II-application to deposition and etching*. IEEE Trans. Electron Devices, 1980. **27**(8): p. 1455.
171. Blech, I.A. and H.A.V. Plas, *Step coverage simulation and measurement in a dc planar magnetron sputtering system*. J. Appl. Phys., 1983. **54**(6): p. 3489.
172. Brett, M.J., K.L. Westra, and T. Smy, *Simulation of step coverage profiles and film microstructure*. IEDM Tech. Digest, 1988: p. 336.
173. Gérodolle, A.F. and J. Pelletier, *Two-dimensional implication of purely reactive model for plasma etching*. IEEE Trans. Electron Devices, 1991. **38**(9): p. 2025.
174. Singh, V.K., E.S.G. Shaqfeh, and J.P. McVittie, *Simulation of profile evolution in silicon reactive ion etching with re-emission and surface diffusion*. Journal of

- Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, 1992. **10**(3): p. 1091-1104.
175. Zheng, i. and J.P. McVittie, *Modeling of side wall passivation and ion saturation effects on etching profiles*. NUPAD V Int. Workshop on Numerical Modeling of Processes and Devices for Integrated Circuits (5-6 June 1994), 1994: p. 37.
 176. Harafuji, K. and A. Misaka, *Dry etching topography simulator with a new surface reaction model MODERN*. IEEE Trans. Electron Devices, 1995. **42**(11): p. 1903.
 177. Chang, J.P., A.P. Mahorowala, and H.H. Sawin. *Plasma-surface kinetics and feature profile evolution in chlorine etching of polysilicon*. 1998. Shirahama, Wakayama (Japan): AVS.
 178. Zhou, R., et al., *Simulation of the Bosch process with a string-cell hybrid method*. Journal of Micromechanics and Microengineering, 2004. **14**(7): p. 851-858.
 179. Tsuda, H., et al., *Atomic-Scale Cellular Model and Profile Simulation of Si Etching: Analysis of Profile Anomalies and Microscopic Uniformity*. Japanese Journal of Applied Physics, 2010. **49**(8): p. 08JE01-08JE01.
 180. Malik, R., et al., *Flux based modeling and simulation of dry etching for fabrication of silicon deep trench structures*. Journal of Physics: Conference Series, 2011. **276**: p. 012078-012078.
 181. Dussart, R., et al., *Passivation mechanisms in cryogenic SF₆/O₂ etching process*. Journal of Micromechanics and Microengineering, 2004. **14**: p. 190.
 182. Nagaoka, T., et al., *Classical interatomic potential model for Si/H/Br systems and its application to atomistic Si etching simulation by HBr⁺*. Journal of Applied Physics, 2009. **105**(2): p. 023302-023302-6.
 183. Chengli, Z., et al., *Etching Mechanisms of CF₃ Etching Fluorinated Si: Molecular Dynamics Simulation*. Plasma Science and Technology, 2012. **14**(7): p. 670.
 184. Sun, W., et al., *Molecular Dynamics Simulations of Atomic H Etching SiC Surface*. Physics Procedia, 2012. **32**: p. 539-544.
 185. Gou, F., et al., *Molecular dynamics simulations of Cl⁺ etching on a Si (100) surface*. Journal of Applied Physics, 2010. **107**(11): p. 113305-113305-6.
 186. Park, J., et al., *High Density Plasma Etching of Platinum Films in BCl₃/Ar and CF₄/Ar Inductively Coupled Plasmas*. Electronic Materials Letters, 2009. **5**(4): p. 205-208.
 187. Smith, G.L., et al., *PZT-Based Piezoelectric MEMS Technology*. Journal of the American Ceramic Society, 2012.
 188. Yang, F., et al., *The Surface Scattering-Based Detection of Hydrogen in Air Using a Platinum Nanowire*. Nano Letters, 2012.
 189. Bao, J., et al. *Fabrication and evaluation of Pt and Au hybrid and geometric Pt nano vehicle*. 2011. IEEE.
 190. Shibano, T., *Sidewall deposition film in platinum etching with Ar/halogen mixed gas plasmas*. Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures, 1997. **15**(5): p. 1747-1747.

191. Delprat, S., M. Chaker, and J. Margot, *Patterned Platinum Etching Studies in an Argon High-Density Plasma*. Japanese Journal of Applied Physics, 1999. **38**(7): p. 4488-4491.
192. Saussac, J., *Élaboration d'un simulateur de gravure par plasma de haute densité basé sur une approche cellulaire pour l'étude de profils dans divers matériaux*, 2010, Université de Montréal.
193. Lu, J. and M.J. Kushner, *Trench filling by ionized metal physical vapor deposition*. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 2001. **19**(5): p. 2652-2652.
194. Robbie, K. and M. Brett, *Sculptured thin films and glancing angle deposition: Growth mechanics and applications*. Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films, 1997. **15**(3): p. 1460-1465.