



EGEM

électronique – génie électrique – microsystèmes

Contraintes mécaniques en micro, nano et optoélectronique

sous la direction de
Mireille Mouis

hermes

Lavoisier

Table des matières

Préface	17
Mireille MOUIS, Anne PONCHET et André ROCHER	
Chapitre 1. L'importance des contraintes en microélectronique	21
Michel BRILLOUËT	
1.1. Introduction	21
1.2. Dynamique de la microélectronique	21
1.3. Les contraintes perçues comme un phénomène à éviter	23
1.3.1. Impact de la courbure des plaques de silicium	23
1.3.2. Défauts générés par les couches contraintes	23
1.3.3. Défauts générés dans les plaques de silicium	24
1.3.4. Contraintes dans les motifs	25
1.4. La compréhension de l'impact des contraintes en microélectronique	27
1.4.1. Impact des contraintes sur la fabrication du transistor MOS	27
1.4.2. La prise en compte des contraintes dans les interconnexions	29
1.5. Les contraintes comme facteur de progrès en microélectronique	30
1.5.1. Le <i>gettering</i>	30
1.5.2. L'ingénierie des contraintes	31
1.6. Conclusion	33
1.7. Bibliographie	33
Chapitre 2. Théorie de l'élasticité des cristaux	35
Joseph MORILLO	
2.1. Introduction	35
2.2. Elasticité linéaire	38
2.2.1. Tenseur des déformations	38

2.2.2. Contraintes et équilibre	42
2.2.3. Elasticité linéaire – Loi de Hooke	45
2.2.4. Energétique	46
2.2.5. Symétries	48
2.2.6. Représentation matricielle de Voigt	49
2.3. Symétries cristallines et élasticité linéaire	50
2.3.1. Invariance par symétrie cristalline	51
2.3.2. Effet des opérations de symétrie	51
2.3.3. Exemple de la symétrie cubique	53
2.3.4. Interprétation physique	55
2.3.5. Approximation du solide isotrope	56
2.4. Détermination des tenseurs des contraintes et des déformations	59
2.5. Thermoélasticité	60
2.6. Mesure et calcul des constantes élastiques	62
2.7. Conclusion	64
2.8. Bibliographie	66
2.9. Annexe : tenseurs euclidiens	67
2.9.1. Réponse linéaire – Tenseurs	68
2.9.2. Co- et contravariance – Tenseur de métrique	71
2.9.3. Propriétés utiles	73

Chapitre 3. Introduction à la thermodynamique des systèmes contraints 77

Frank GLAS

3.1. Introduction	77
3.2. Thermodynamique classique des systèmes homogènes	78
3.2.1. Principes fondamentaux et paramètres extensifs	78
3.2.2. Paramètres intensifs et états d'équilibre	80
3.2.3. Potentiels thermodynamiques et états d'équilibre en présence de réservoirs	81
3.2.4. Diagrammes de phases – Règles et constructions	82
3.2.5. Déformations et contraintes homogènes	84
3.3. Thermodynamique des solides contraints inhomogènes	85
3.3.1. Introduction	85
3.3.2. Equilibre interne d'une seule phase solide – Potentiels de diffusion	88
3.3.3. Equilibre entre deux phases solides	90
3.4. Surfaces et interfaces	96
3.4.1. Quantités d'excès liées à une interface plane	96
3.4.2. Prise en compte de l'interface dans l'équilibre entre deux phases	97
3.5. Aspects cinétiques	98

3.6. Conclusion	99
3.7. Bibliographie	100
Chapitre 4. Description élastique d'une surface et de ses défauts	103
Andrés SAÚL, Pierre MÜLLER	
4.1. Introduction	103
4.2. Concepts de base : contraintes de surface d'une surface plane	104
4.2.1. Energie élastique volumique	104
4.2.2. Description élastique d'une phase de dimensions finies	105
4.2.3. Effets des contraintes sur la description thermodynamique d'une surface	110
4.2.4. Description atomistique	113
4.3. Description élastique de marches et de faces vicinales	117
4.3.1. Action d'une force ponctuelle sur un milieu semi-infini	117
4.3.2. Cas du corps libre de toute contrainte externe	119
4.3.3. Cas du corps soumis à des contraintes externes	125
4.4. Description élastique de quelques autres défauts de surface	127
4.4.1. Défauts de dimension nulle : les adatoms	127
4.4.2. Domaines périodiques	129
4.4.3. Généralisation	131
4.5. Bibliographie	132
Chapitre 5. Rôle des contraintes mécaniques dans les technologies silicium	135
Alain PONCET	
5.1. Introduction	135
5.2. Les contraintes générées par les différentes étapes technologiques	138
5.2.1. Contraintes thermiques	138
5.2.2. Hétéro-épitaxie, épitaxie localisée, report de couche	141
5.2.3. Croissance thermique de couches	143
5.2.4. Dépôt	150
5.2.5. Gravure	152
5.2.6. Implantation ionique, amorphisation, recristallisation	153
5.3. Les contraintes qui interagissent avec les procédés eux-mêmes	155
5.3.1. Influence des contraintes mécaniques sur la stabilité des couches épitaxiées	155
5.3.2. Influence des contraintes mécaniques sur la diffusion des dopants	155
5.3.3. Influence des contraintes mécaniques sur les cinétiques de croissance thermique des couches	163
5.3.4. Influence des contraintes sur la gravure	171

12 Contraintes mécaniques en microélectronique

5.3.5. Dégradation des interconnexions métalliques : le *stress-voiding* 172
5.3.6. Polissage mécano-chimique 174
5.4. Conclusion 175
5.5. Bibliographie 175

Chapitre 6. Croissance cristalline et génération de contraintes 183
Stéphane ANDRIEU

6.1. Introduction 183
6.2. Contraintes lors de la croissance d'un film continu 184
6.2.1. Modèle de Frenkel-Kontorova/Frank-Van der Merwe 184
6.2.2. Evidences expérimentales du modèle de Frank et Van der Merwe 188
6.2.3. Généralisation à deux dimensions 190
6.2.4. Relaxation plastique et épaisseur critique 192
6.2.5. Comparaison semi-conducteurs/métaux 195
6.3. Contraintes lors de la croissance d'îlots non coalescés 196
6.3.1. Relaxation en bord d'îlots 2D 196
6.3.2. Îlots 3D contraints et mode de croissance Stranski-Krastanov 198
6.3.3. Défauts à la coalescence : dislocations, macles 199
6.4. Conclusion 201
6.5. Bibliographie 201

Chapitre 7. Relaxation élastique des contraintes 203
Frank GLAS

7.1. Introduction 203
7.2. Définitions, méthodes et premiers exemples 204
7.2.1. Déformation propre 204
7.2.2. Processus d'Eshelby – Energie élastique 205
7.2.3. Méthodes de calcul de la relaxation 208
7.3. Instabilité d'un alliage homogène vis-à-vis de variations spatiales de sa composition – Rôle des contraintes élastiques 209
7.3.1. Décomposition spinodale 210
7.3.2. Stabilité linéaire 211
7.3.3. Relaxation élastique des contraintes dans la décomposition spinodale 212
7.3.4. Modification du domaine d'instabilité par les contraintes et microstructure induite 214
7.3.5. Effet d'une surface libre 215
7.4. Relaxation morphologique d'un solide sous contrainte non hydrostatique 216

7.4.1. Introduction	216
7.4.2. Calcul des champs de relaxation élastique	217
7.4.3. Instabilité ATG	219
7.4.4. Croissance en îlots – Mode Stranski-Krastanov	222
7.5. Couplage entre instabilités morphologique et compositionnelle	223
7.6. Bibliographie	225

Chapitre 8. Relaxation plastique des couches métalliques par dislocations et diffusion de matière 229

Marc LEGROS

8.1. Introduction	229
8.2. Propriétés mécaniques d'une couche métallique parfaitement adhérente sur un substrat rigide	231
8.2.1. Méthode de la courbure – Cycles thermiques	231
8.2.2. Limite d'élasticité	232
8.2.3. Déformation par cycle	233
8.2.4. Variation de σ_{RT} en fonction de h – Données expérimentales	234
8.3. Modèles de relaxation plastique	235
8.3.1. Cartes de mécanismes de déformation	235
8.3.2. Modèles de plasticité basés sur le confinement des dislocations	238
8.3.3. Diffusion aux joints – Modèle de Gao	246
8.4. Comparaison avec les données expérimentales et les observations microstructurales	247
8.4.1. Microstructure initiale des films métalliques	247
8.4.2. Evolution de la densité volumique de dislocations	248
8.4.3. Activation de dislocations traversantes, évolution de leur densité	250
8.4.4. Saturation de la limite d'élasticité	252
8.4.5. Apport de la microscopie <i>in situ</i> , observations dynamiques, interaction dislocation-interface	253
8.4.6. Relaxation par glissement de dislocations ou par diffusion aux joints?	255
8.5. Conclusion	256
8.6. Bibliographie	257

Chapitre 9. Phénomènes d'endommagement des films minces : des structures de cloquage aux propriétés mécaniques locales 261

Christophe COUPEAU

9.1. Introduction	261
9.2. Contraintes internes induites lors de dépôts par voie PVD	264
9.3. Modèles de cloquage des films minces	265

9.4. Comportement mécanique de films minces sous contrainte	268
9.5. Influence du substrat	271
9.6. Morphologie des structures de cloquage	275
9.7. Vers les propriétés mécaniques locales	280
9.8. Bibliographie	282

Chapitre 10. Exploitation des contraintes dans les structures

à base de semi-conducteurs	285
---------------------------------------------	------------

Chantal FONTAINE

10.1. Introduction	285
10.2. Contraintes et structures à multicouches	286
10.3. Contrôle des caractéristiques des boîtes quantiques par les conditions de croissance et par l'empilement	289
10.4. Relaxation de la contrainte par effet d'alliage et organisation latérale des boîtes quantiques	291
10.5. Contrôle de la localisation des boîtes quantiques par la structuration de surface et l'utilisation de masques diélectriques . . .	292
10.6. Contrôle de la localisation des boîtes quantiques par l'utilisation de surfaces structurées à contrainte modulée	296
10.7. Organisation dirigée de boîtes quantiques et substrats à dislocations enterrées	297
10.8. Conclusion	301
10.9. Bibliographie	301

**Chapitre 11. Apports et limites d'une approche atomistique
de la croissance hétéro-épitaxiale**

305

Christine GOYHENEX

11.1. Introduction	305
11.2. Les différents niveaux de modélisation	306
11.2.1. Modélisation des (ré)arrangements atomiques : dynamique moléculaire	306
11.2.2. Simulations multi-échelles : le Monte-Carlo	307
11.3. Structure électronique : cas des métaux de transition et nobles	308
11.3.1. Formalisme des liaisons fortes	308
11.3.2. Approximation du second moment (SMA)	312
11.4. Applications aux systèmes métalliques	313
11.4.1. Modes de relaxation des contraintes aux surfaces : reconstructions	313
11.4.2. Modes de relaxation des contraintes aux interfaces et surstructures	316

11.4.3. Mécanismes microscopiques en croissance	320
11.4.4. Simulations à plus grande échelle (Monte-Carlo) : croissance organisée de Co/Au(111)	323
11.5. Conclusion	325
11.6. Bibliographie	326

Chapitre 12. Utilisation des éléments finis pour l'analyse des contraintes 329

Roland FORTUNIER

12.1. Introduction	329
12.2. Formulation du problème	330
12.2.1. Equation d'équilibre mécanique	330
12.2.2. Loi de comportement élastique linéaire	332
12.2.3. Conditions aux limites	333
12.2.4. Formulation faible	334
12.3. Approximation par éléments finis	336
12.3.1. Discrétisation	336
12.3.2. Assemblage et résolution	339
12.3.3. Les principaux types d'éléments	341
12.3.4. Les sources d'erreur et leur estimation	344
12.4. Exemples	346
12.4.1. Quelques résultats de calcul	346
12.4.2. Allongement d'une poutre sous son poids	348
12.5. Bibliographie	351

Chapitre 13. Analyse des contraintes et déformations de films minces par diffraction des rayons X et mesure de courbure 353

Patrice GERGAUD

13.1. Introduction	353
13.2. Mesure de courbure de plaques	353
13.2.1. Formule de Stoney	353
13.2.2. Limites de validités, corrections et erreurs associées à la formule de Stoney	355
13.2.3. Extensions d'application de la formule de Stoney	359
13.3. Méthodes expérimentales et exemple d'application	361
13.3.1. Méthodes	361
13.3.2. Exemple de mesures <i>in situ</i> de courbure du substrat	362
13.4. Mesures de déformation/contrainte par diffraction des rayons X	363
13.4.1. Diffraction des rayons X et mesure de déformation	363
13.4.2. Détermination des contraintes à partir des déformations	365
13.4.3. Spécificité de la diffraction X dans l'analyse de contrainte	368

13.4.4. Appareillage	371
13.4.5. Exemple de détermination des contraintes par la méthode des $\sin^2\psi$	371
13.4.6. Cas particuliers dans les films minces	372
13.4.7. Précaution à prendre dans le cas des films minces	375
13.4.8. Exemple d'application pour un film épitaxié ou très texturé	376
13.5. Conclusion	377
13.6. Bibliographie	377

Chapitre 14. Influence des contraintes sur les propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs. 379

Frédéric ANIEL, Soline RICHARD, Sébastien SAUVAGE, Philippe BOUCAUD et Guy FISHMAN

14.1. Introduction	379
14.2. Contraintes et structures électroniques	380
14.2.1. Quelques rappels sur la structure électronique des semi-conducteurs massifs	380
14.2.2. Influence des contraintes	385
14.2.3. Contraintes et confinement.	391
14.2.4. Conclusion	395
14.3. Contraintes et optique	396
14.3.1. Généralités	396
14.3.2. Structures 1D.	400
14.3.3. Structures 0D.	410
14.4. Contraintes et transport	416
14.4.1. Généralités sur le transport 3D et 2D.	416
14.4.2. Influence des contraintes mécaniques sur le transport dans les semi-conducteurs.	426
14.4.3. Conclusion sur l'influence des contraintes mécaniques et le transport pour les composants électroniques	437
14.5. Conclusion	439
14.6. Bibliographie	439

Index	443
------------------------	-----