

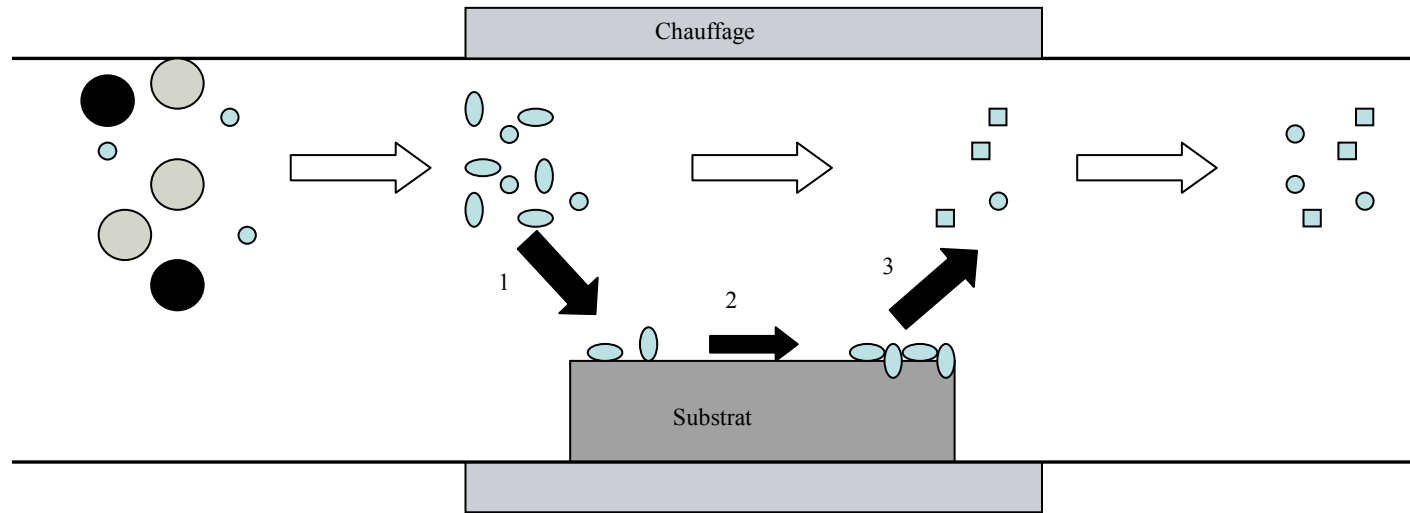
Modélisation de la croissance CVD par une méthode de Monte Carlo Cinétique

Elisabeth BLANQUET

**Laboratoire de Thermodynamique
et Physico Chimie Métallurgiques**

CNRS – INPG - UJF

Principe du procédé CVD



● ○ Molécules de gaz initiales

◐ ◑ Molécules de gaz réactives

◓ ◔ Produits de réaction

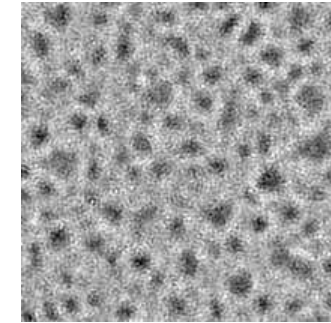
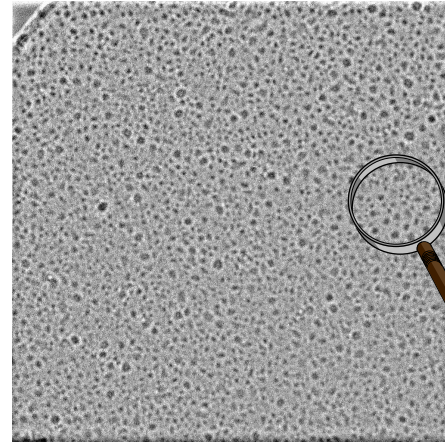
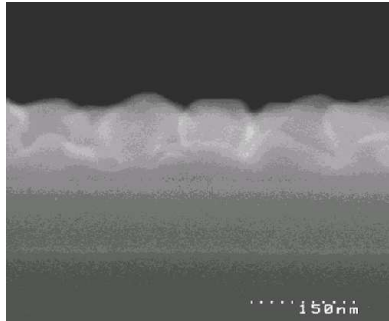
→ Transports de gaz

➔₁ Diffusion et Adsorption des espèces réactives

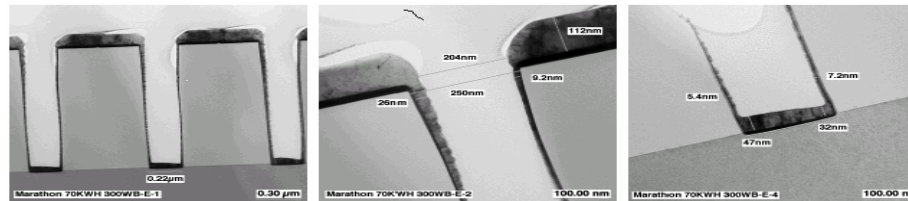
➔₂ Diffusion de surface
Réactions chimiques hétérogènes
Croissance du film

➔₃ Désorption et Diffusion des produits de réaction gazeuse

Dépôt de silicium 2D ou 3D de Si à partir de silane/hydrogène $\text{SiH}_4 + \text{H}_2$

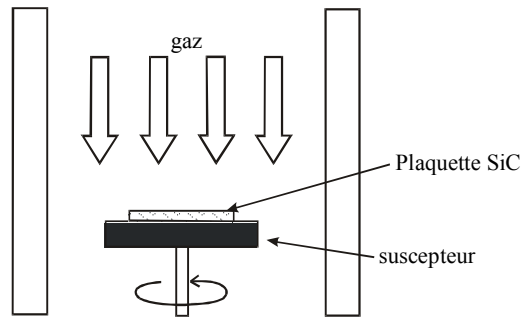


Dépôt de silicium dans une tranchée (via) à partir de $\text{SiH}_4 + \text{H}_2$

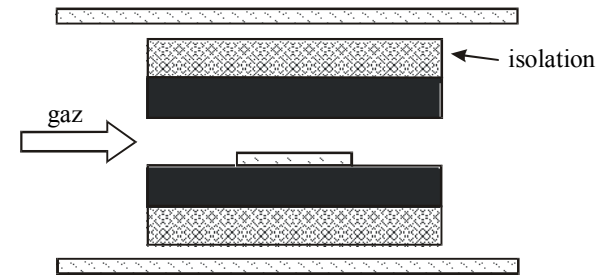


Réacteurs CVD

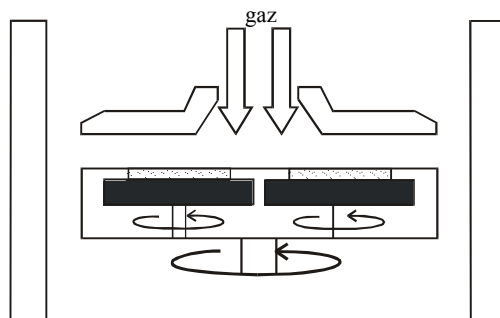
Réacteur vertical
1900 K, ~800 rpm



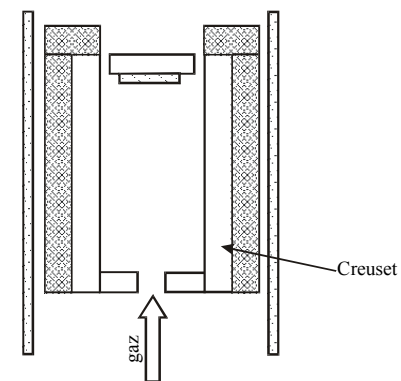
Réacteur horizontal à murs chauds
1900 K,



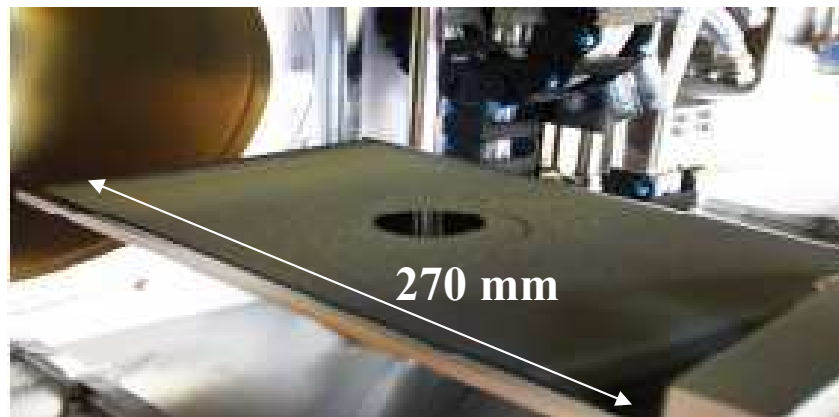
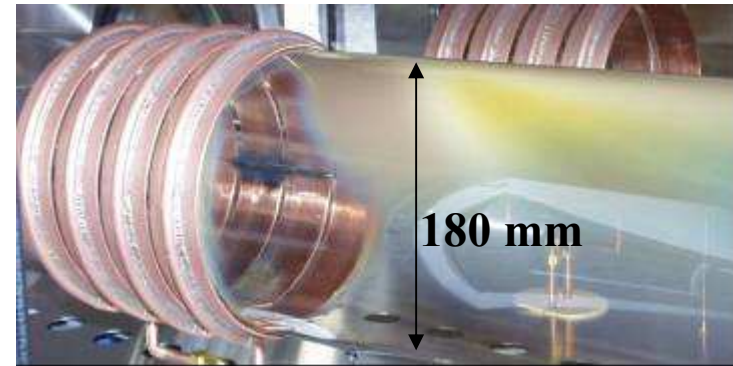
Réacteur planétaire
multi-wafer, > 1900 K



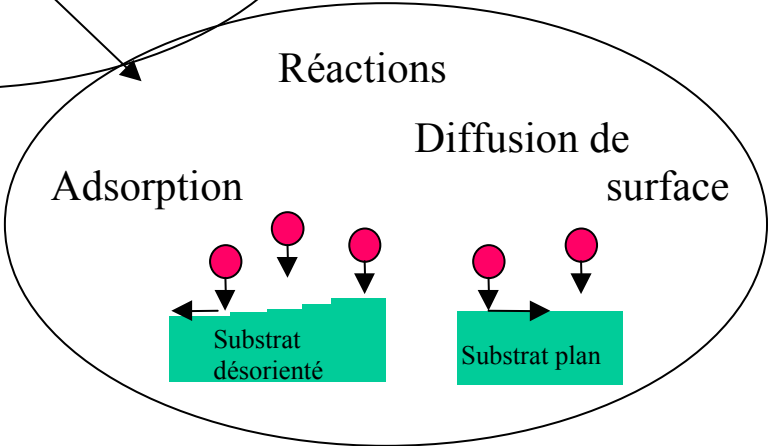
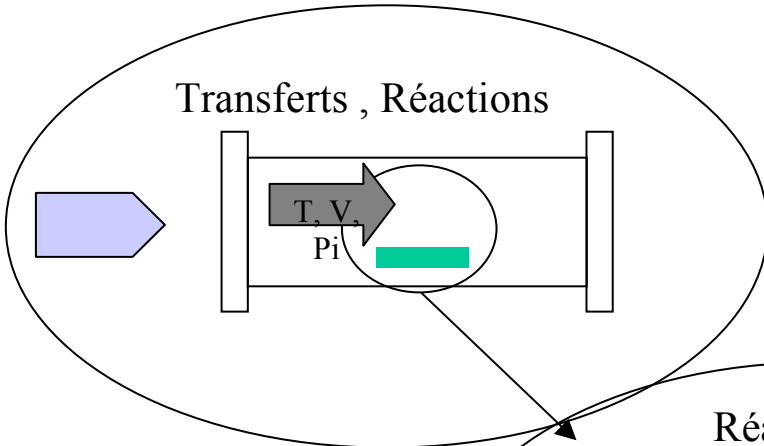
Réacteur HTCVD
2050-2200 K



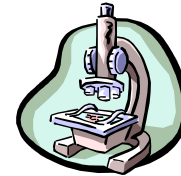
Réacteur CVD à murs chauds



Caractérisations in situ,
Pi, Ci, T



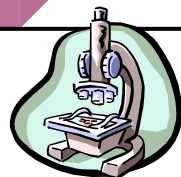
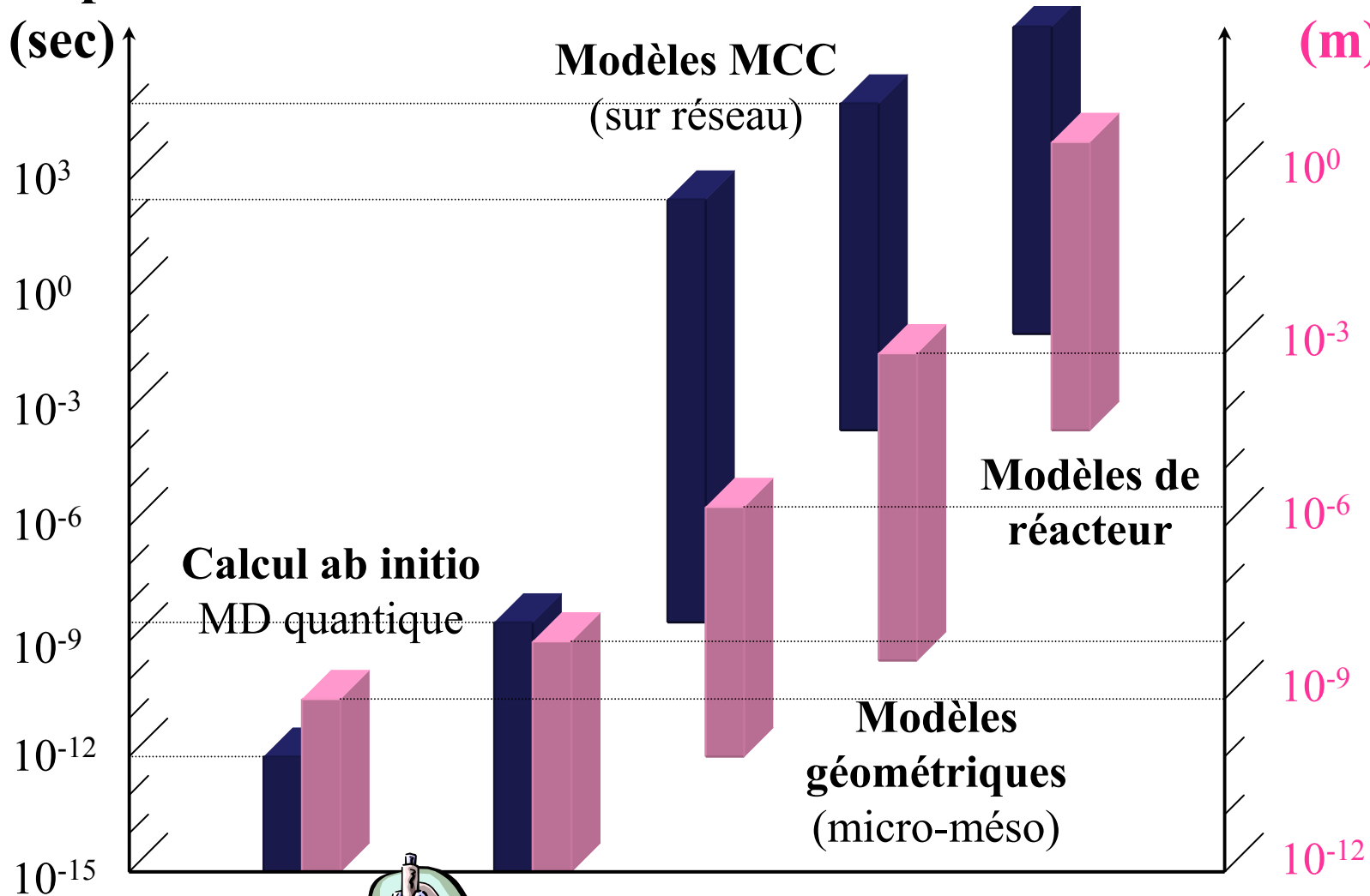
Caractérisations ex situ
microstructure,
uniformité



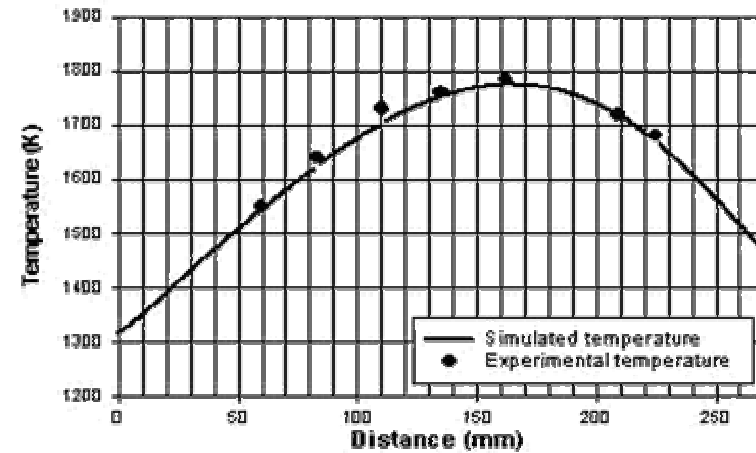
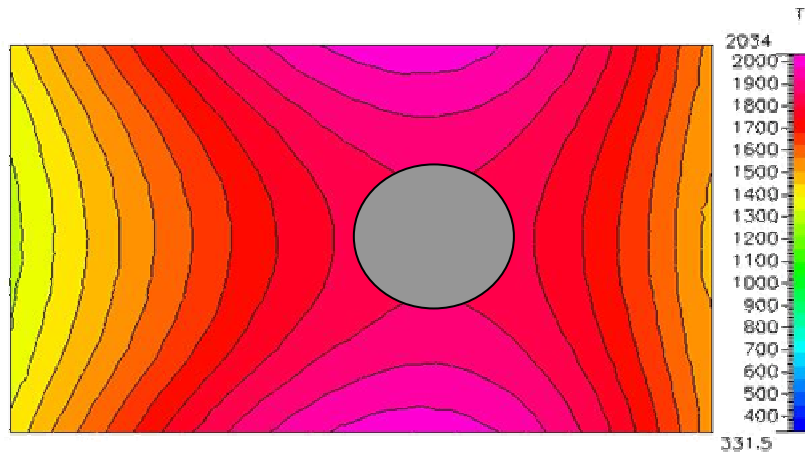
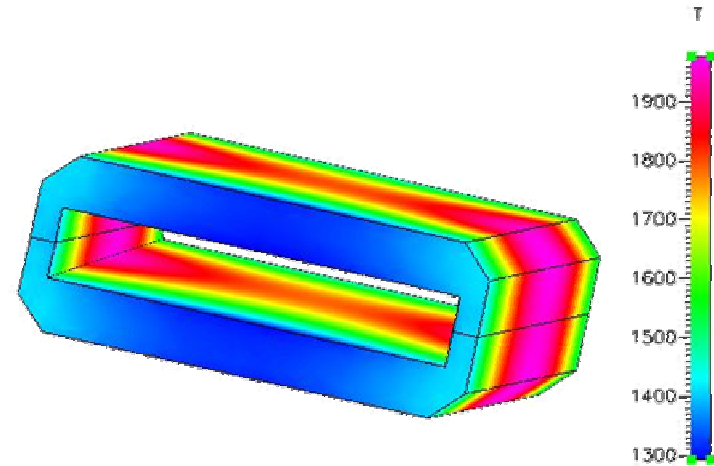
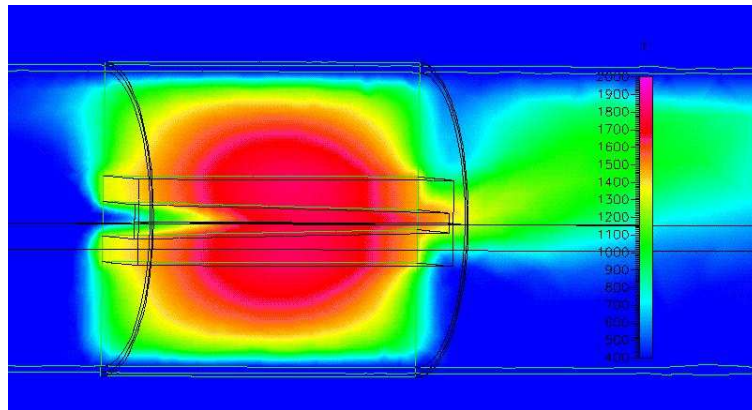


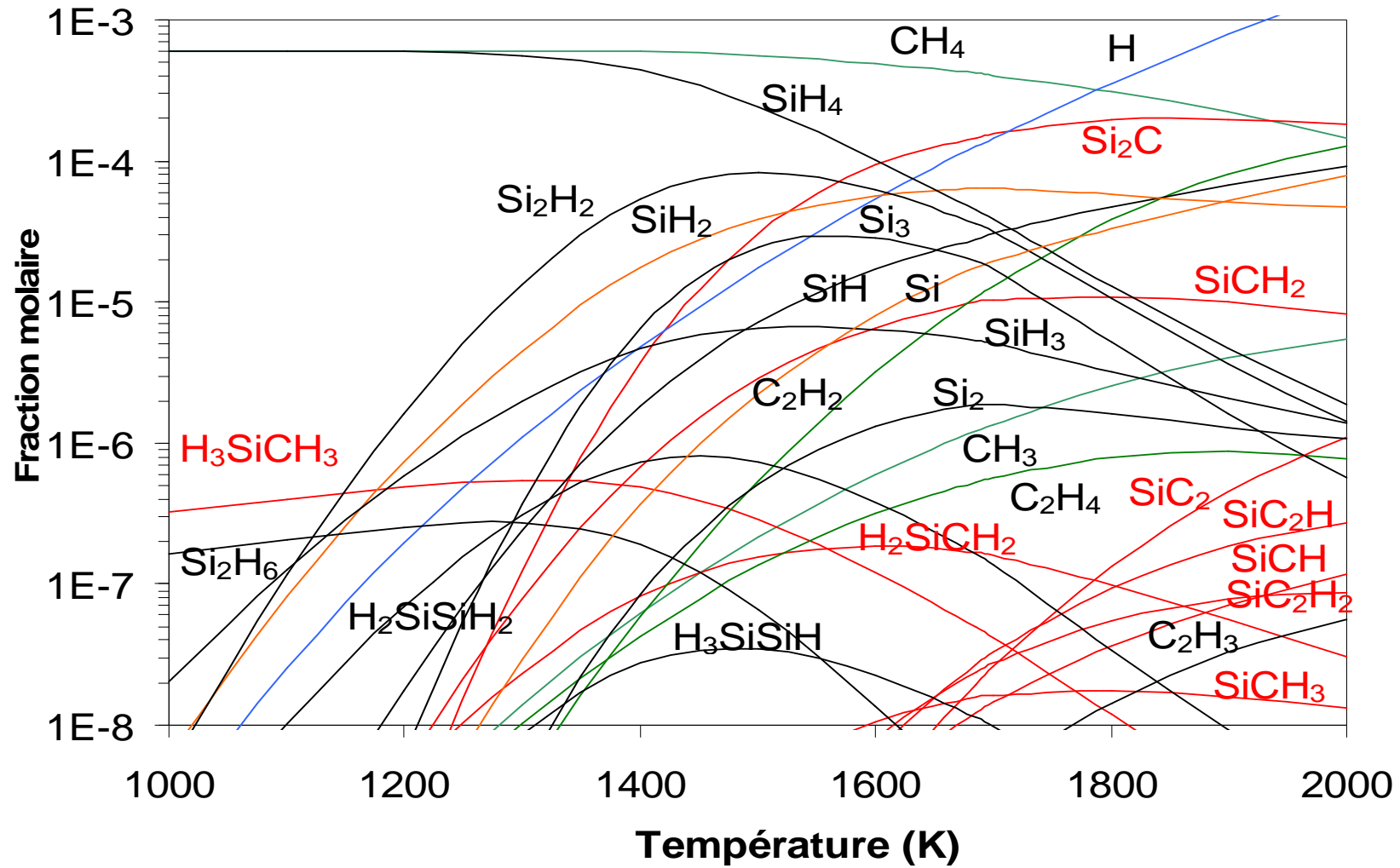
temps
(sec)

dimension
(m)



Distribution de température dans le réacteur : Régime permanent

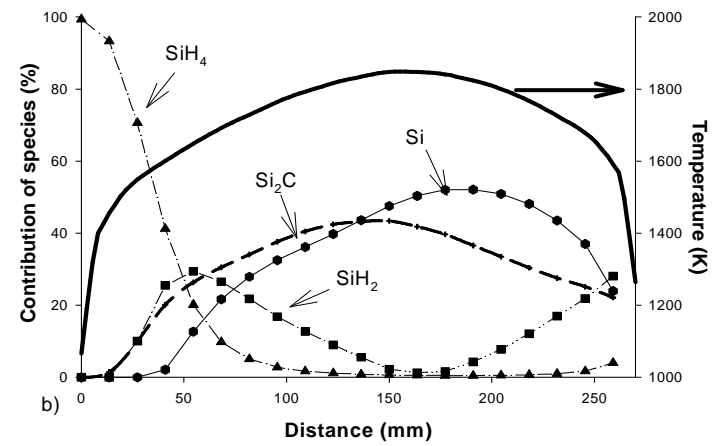
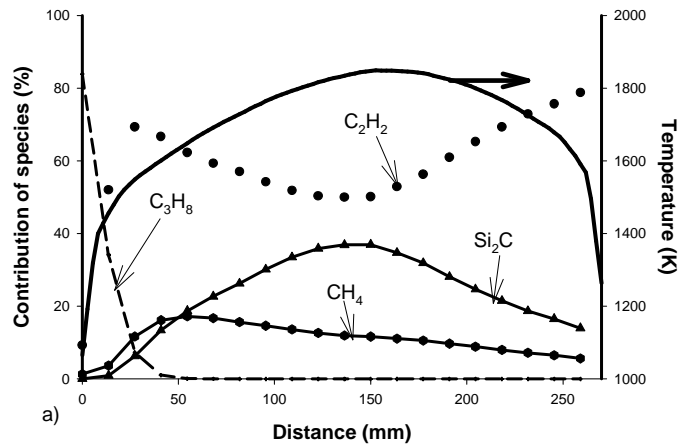




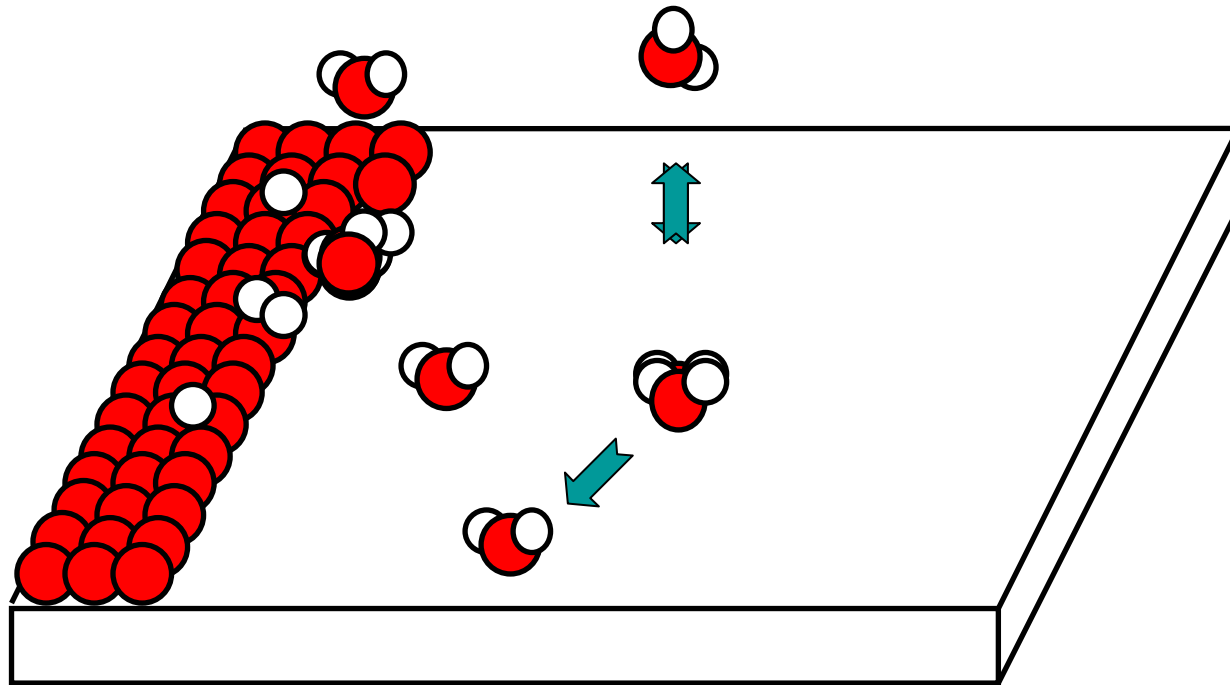
Résultats simulations cinétiques

Contribution des espèces au dépôt : C_2H_2 , Si_2C , CH_4 pour le dépôt de C

SiH_4 , SiH_2 , Si , Si_2C pour le dépôt de Si

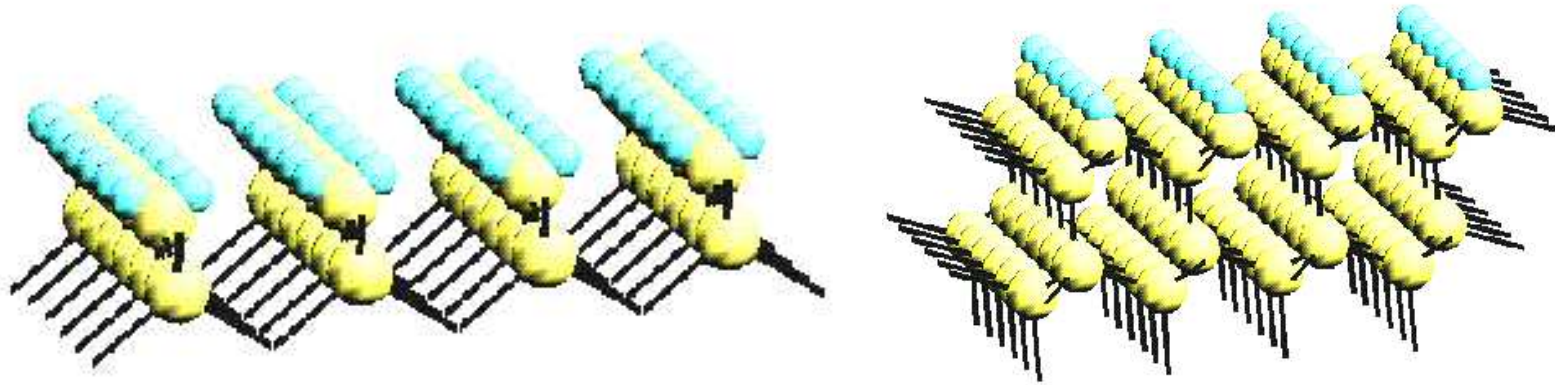


Processus élémentaires considérés



- 1- impact molécules incidentes*
- 2- a) adsorption b) réflexion*
- 3- diffusion adsorbats*
- 4- désorption adsorbats*
- 5- réaction*
- 6- évaporation*

Description des évènements : cas du dépôt de silicium à partir de silane SiH_4



(100)

Plan de croissance

(111)

Réseau Silicium

1) Flux de précurseurs SiH_4 / SiH_2 / H_2 calculés à partir du modèle de réacteur molécules/cm².s

2) Diffusion des espèces en surfaces

$$P_{dif}^a (c \rightarrow p) = \frac{P_{dif}^r (c \rightarrow p)}{\sum_{p \text{ sites possibles}} P_{dif}^r (c \rightarrow p)}$$

$$P_{dif}^r (c \rightarrow p) = \alpha_p e^{-E_{dif}/RT}$$

P_{dif}^r Probabilité relative de l'adsorbat du site courant vers un site possible

E_{dif} dépend de l'environnement du site courant
(nbre de premiers , deuxièmes voisins) (interaction de Van Der Waals)

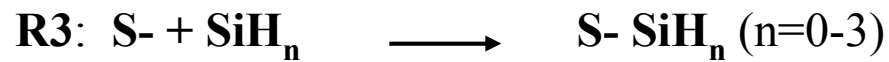
3) Réactions des adsorbats en surface



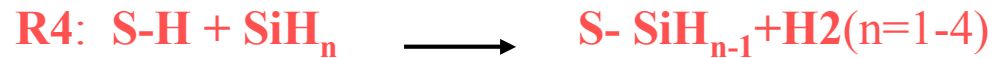
$$P1=1$$



$$P2=\exp(-E2/RT)$$



$$P3= \frac{\sum_{i=1}^{n_s} \binom{4-i}{n_a-i}}{\binom{4}{n_a}}$$



$$P4=\exp(-(npv-4)E4/RT)$$

4) Désorption des adsorbats

$$P_{des} \propto \frac{e^{-(npvE_{des}/RT)}}{\sum_{n=1}^4 e^{-(nE_{des}/RT)}}$$

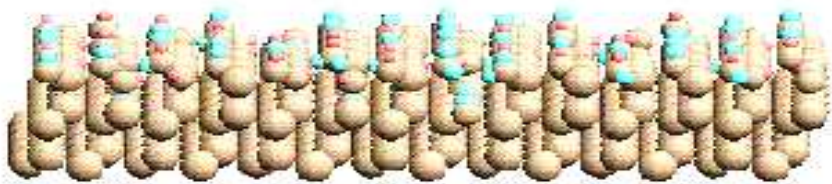
5) Evaporation d'un atome de silicium

$$n_{evap} \propto e^{-npvE_{evap}/RT}$$

Résultats des simulations MCC

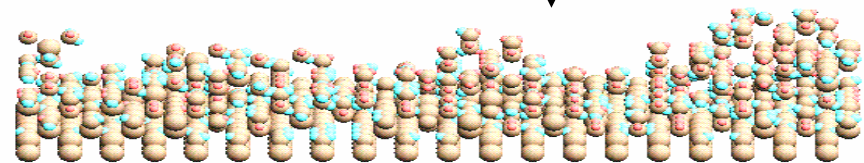
Dépôt de silicium 2D ou 3D sur une surface Si (100) à 850 K

SiH_4/H_2



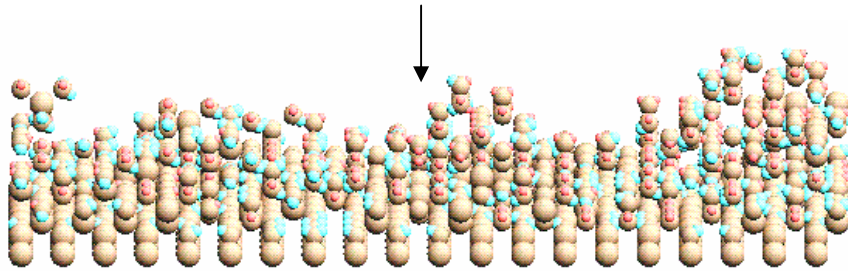
Réseau 20*10

SiH_2/H_2



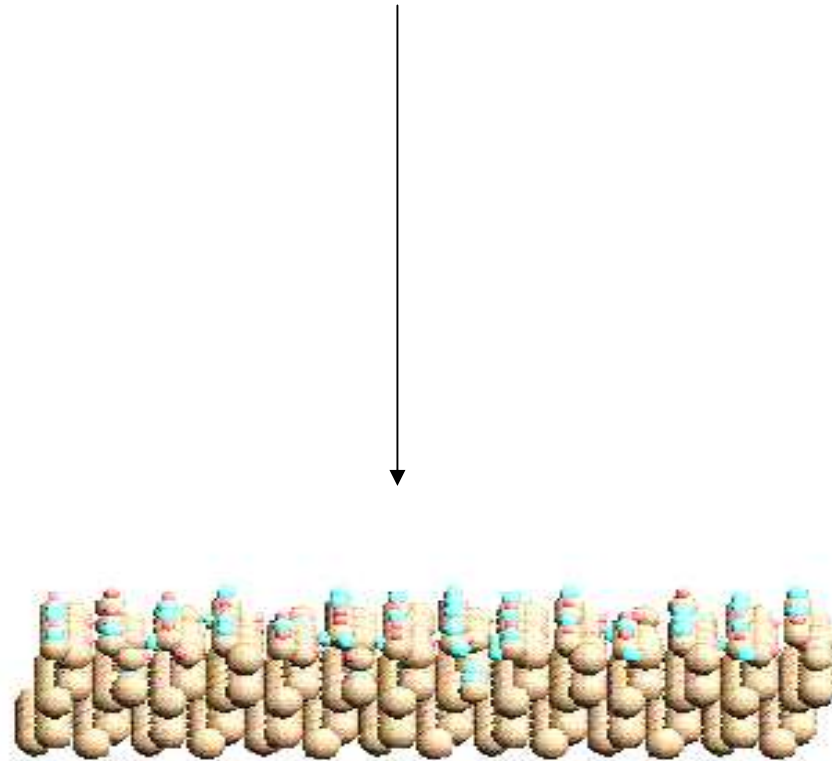
Dépôt de silicium 2D ou 3D à partir de silylène/hydrogène SiH_2/H_2 , à 850 K

sur une surface Si (100)



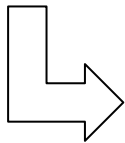
Réseau 20×10

sur une surface Si (111)



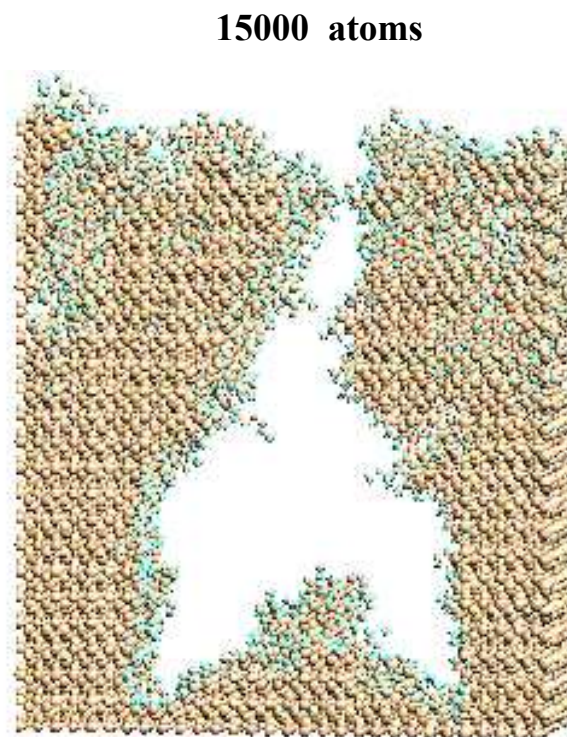
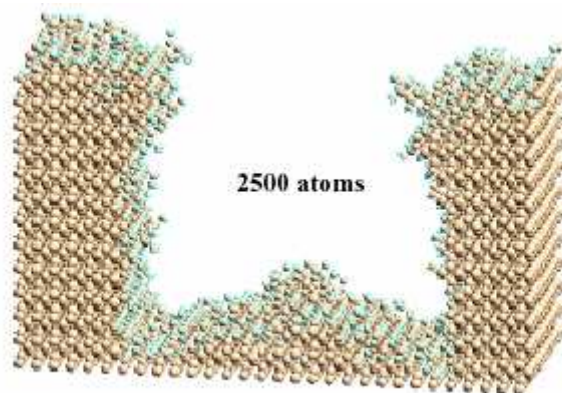
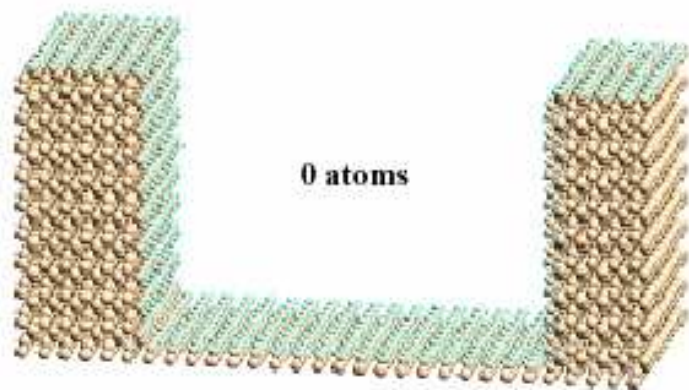
Dépôt de silicium 2D ou 3D sur une surface Si (100) à 850 K

- **Influence de la topographie de surface
(nombre de liaisons de surface)**
- **Influence du gaz précurseur SiH_4 / SiH_2
 SiH_2 / H_2 favorise la croissance en îlots sur (100)**



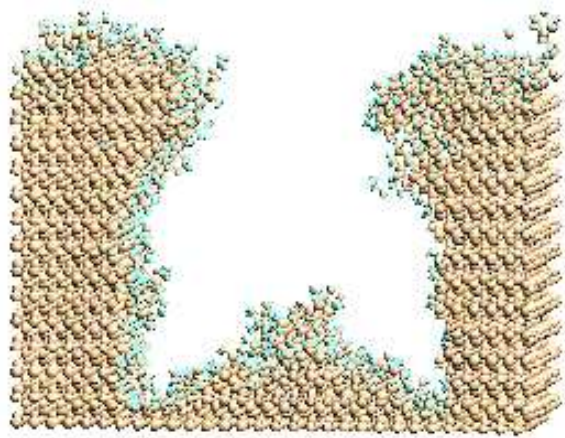
Conditions de dépôt haute pression, haute température

Dépôt de silicium dans une tranchée (via) à partir de $\text{SiH}_4 + \text{H}_2$ à 900 K

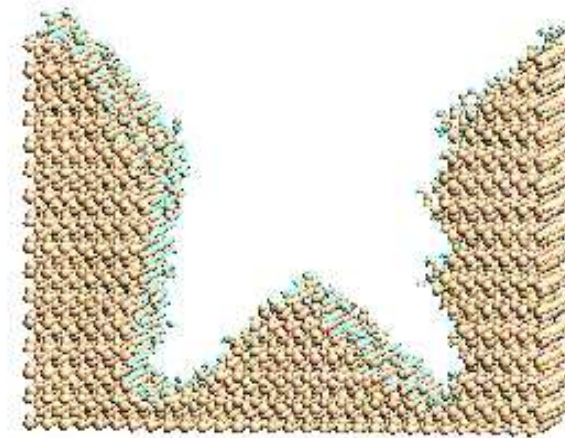


Dépôt de silicium dans une tranchée (via) à partir de $\text{SiH}_4 + \text{H}_2$

à 900 K



à 500 K

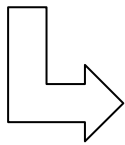


4500 atomes

Conclusions

- Modes de croissance
- Remplissage de vias

Modèle de structure en fonction des paramètres expérimentaux



Conditions de dépôt les plus adaptées