



HAL
open science

Modélisation multi-échelle du comblement par LPCVD de tranchées profondes pour la fabrication de nouveaux composants de puissance

Lionel Jaouen, Fabrice Roqueta, Emmanuel Scheid, Hugues Vergnes, Brigitte Caussat

► To cite this version:

Lionel Jaouen, Fabrice Roqueta, Emmanuel Scheid, Hugues Vergnes, Brigitte Caussat. Modélisation multi-échelle du comblement par LPCVD de tranchées profondes pour la fabrication de nouveaux composants de puissance. 10ème Congrès de la Société Française de Génie des Procédés, Sep 2005, Toulouse, France. pp.0, 2005. hal-04104732

HAL Id: hal-04104732

<https://hal.science/hal-04104732>

Submitted on 24 May 2023

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

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

MODELISATION MULTI-EHELLES DU COMPLEMENT PAR LPCVD DE TRANCHEES PROFONDES POUR LA FABRICATION DE NOUVEAUX COMPOSANTS DE PUISSANCE

Lionel JAUEN^{1,3}, Fabrice ROQUETA¹, Emmanuel SCHEID², Hugues VERGNES³, Brigitte CAUSSAT³

¹STMicroelectronics, 16 rue Pierre et Marie, 37071 Tours Cedex 2

²LAAS/CNRS, 7 avenue du Colonel Roche, 31077 Toulouse Cedex 4

³LGC/ENSIACET/INPT, 5 rue Paulin Talabot, BP1301, 31106 Toulouse Cedex 1



Objectifs

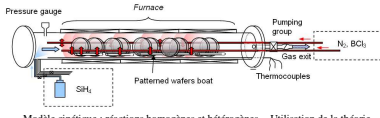
L'objectif général de cette étude est d'accroître le niveau d'intégration et les performances des composants microélectroniques. Dans le cas des capacités par exemple, une solution efficace pour réduire l'aire d'occupation en surface du substrat tout en conservant de fortes capacités est de fabriquer des structures à trois dimensions, impliquant la gravure puis le comblement de tranchées profondes dans le volume des plaquettes de silicium. La fabrication de ces capacités 3D implique en particulier le dépôt par LPCVD de matériaux à base de silicium dans des tranchées de largeur submicronique à très fort rapport de forme (le rapport de la profondeur sur la largeur des gravures peut excéder 50). C'est dans le but de préparer les voies de conception et d'optimisation de ces procédés LPCVD pour le comblement de tranchées profondes qu'une étude de modélisation multi-échelles a été engagée. Cette étude vise à développer un ensemble auto-cohérent de modèles numériques - hiérarchisés selon les échelles de longueur et de temps établie au sein de l'ensemble physique - permettant de représenter localement les phénomènes physico-chimiques en jeu, de l'échelle du réacteur jusqu'à celle de la tranchée, en vue de disposer d'outils performants de simulation et d'optimisation du comportement du procédé.

Résumé

Dans un premier temps, deux modèles de simulation d'un réacteur de LPCVD (Low Pressure Chemical Vapor Deposition) industriel - 2D-axisymétrique puis 3D - ont été mis au point sur la base du code de CFD Fluent, qui permettent d'accéder aux cartes de vitesses d'écoulement, de température, de composition du gaz et de vitesses de dépôt en tout point de l'équipement. Un modèle à l'échelle des tranchées a ensuite été développé, toujours sur la base du code Fluent, qui permet de suivre l'évolution du profil en épaisseur du dépôt avec le temps. À des fins de comparaison et de validation, des simulations à l'échelle des tranchées ont été effectuées avec le code balistique Evolve (Jale et al. R&I). Un modèle intermédiaire mésoscopique (échelle inter-plaques) a enfin été développé, afin d'affiner le choix des conditions aux limites à l'échelle de la tranchée, et d'effectuer une étude de sensibilité du niveau de couplage des deux échelles, spécialement dans le cas de motifs de gravure engendrant de fortes surfaces spécifiques. Des résultats sont présentés dans le cas du dépôt de silicium pur à partir de silane SiH₄ puis dans celui du dépôt de silicium dopé in situ au bore, à partir de silane et de trichlorure de bore BCl₃, et enfin des simulations ont été effectuées pour différentes valeurs arbitrairement de fractions molaires en silylène SiH₂, pouvant correspondre à des dopages in situ au phosphore à partir de silane et de phosphine PH₃. Un bon accord a été observé entre le modèle de tranchée Fluent et le modèle balistique Evolve, même pour les dépôts très peu conformes (fortes fractions molaires en SiH₂), pour des temps calcul trois fois moins importants dans le cas de notre modèle Fluent. COMPLETER?

Le réacteur de dépôt étudié et sa modélisation

⇒ Réacteur tubulaire horizontal à paroi chaude : 2150mm x 220mm - 5 nacelles de 26 plaques (Ø=150mm, épaisseur=0,508mm) ♦ Spires chauffantes (3 compartiments) : 1600mm de longueur ♦ Dopage in-situ : 2 cannes d'injection répartie en position diamétralement opposée dans le réacteur - 12 orifices (Ø=0,8mm) par canne, 2 à 2 en vis-à-vis, chaque couple étant séparé d'un espacement variant logarithmiquement, inversé d'une canne à l'autre

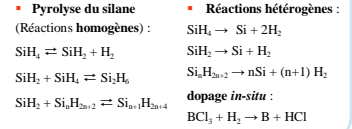


Modèle cinétique : réactions homogènes et hétérogènes - Utilisation de la théorie cinétique des gaz pour la prédiction des propriétés de transport du mélange gazeux - Modèle de transferts thermiques : effets radiatifs couplés aux classiques effets conductifs et convectifs.

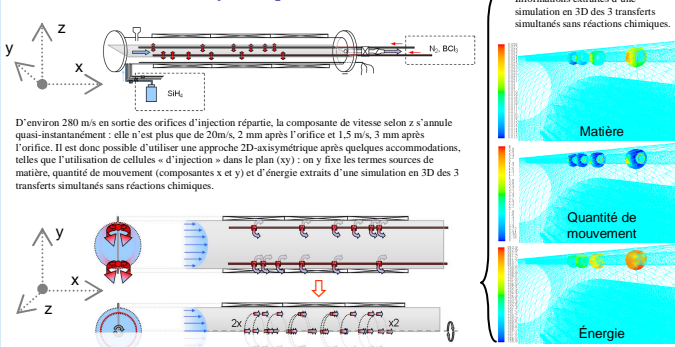
Mécanismes réactionnels

Dans le cas du dopage in situ au bore par le BCl₃ : le BCl₃ exalte le dépôt de silicium via l'insertion du bore dans le dépôt, et l'HCl formé en phase gazeuse lors de la décomposition du BCl₃ au contraire, agit comme un inhibiteur qui vient réduire la vitesse de la réaction dont il est le produit.

Fenêtres d'études ⇒ dopé : 530-555°C, 350mTorr, 170-200scm SiH₄, 15-90scm BCl₃ dilué à 2-6% dans N₂ ♦ non dopé : 600-640°C, 300mTorr, 300scm SiH₄



Canne d'injection : modélisation 3D puis passage de la modélisation 3D à la modélisation 2D-axisymétrique



D'environ 280 m/s en sortie des orifices d'injection répartie, la composante de vitesse selon z s'annule quasi-instantanément : elle n'est plus que de 20m/s, 2 mm après l'orifice et 1,5 m/s, 3 mm après l'orifice. Il est donc possible d'utiliser une approche 2D-axisymétrique après quelques accommodations, telles que l'utilisation de cellules « d'injection » dans le plan (xy) : on y fixe les sources de matière, quantité de mouvement (composantes x et y) et d'énergie extraites d'une simulation en 3D des 3 transferts simultanés sans réactions chimiques.

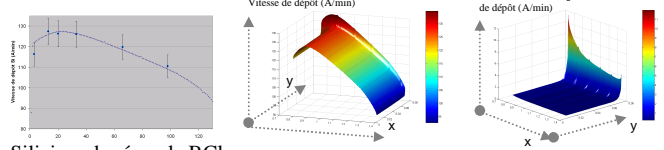
Lors d'utilisation de cannes d'injection répartie, il est donc possible de continuer à considérer une approche 2D-axisymétrique. Cette hypothèse a déjà été utilisée par ailleurs en négligeant la présence des supports de plaques qui d'un point de vue chimique présentent une surface spécifique insignifiante devant celle de la paroi interne du tube et des 130 plaques, et d'un point de vue thermique, sont trop fins pour interférer au niveau du transfert par rayonnement qui s'établit entre les extrémités refroidies et les éléments de la portion chauffée du réacteur.

Modélisation 2D à l'échelle du réacteur (macroscopique) [Kn~1.10-4 - Continuum Flow]

- Hypothèses : gaz parfait - milieu continu - écoulement laminaire (Re<10 même si injection répartie) - milieu optiquement mince

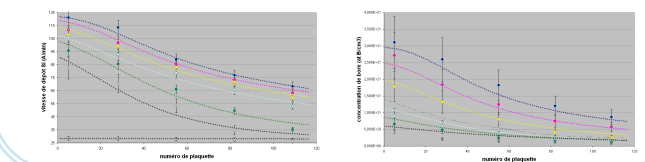
Silicium intrinsèque

620°C ♦ 300mTorr ♦ 300 scm SiH₄



Silicium dopé par le BCl₃

Sans injection répartie [injection de SiH₄, BCl₃ et N₂ par l'avant] - 555°C ♦ 350mTorr ♦ 200 scm SiH₄ ♦ 15-90 scm BCl₃ dilué à 3% dans N₂

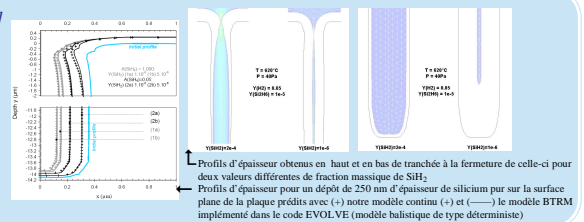


Modélisation à l'échelle de la tranchée (microscopique) [Kn~100 - Free Molecular Flow]

- Spécificité au sein de la tranchée : fréquence des collisions molécules-paroi >>> fréquence des collisions intermoléculaires (Kn ~ 100) ⇒ Régime moléculaire
 ⇒ Calcul transitoire, pour chaque espèce considérée séparément, du coefficient de diffusion de Knudsen fonction de la largeur locale de tranchée. Ce coefficient remplace alors le coefficient de diffusion moléculaire (multi-composants), ainsi que des champs de fraction molaire et des profils de vitesses de dépôt.
 ⇒ Du fait du régime moléculaire, calcul des vitesses de réactions homogènes non implémenté.

- Procédure dynamique de maillage 2D (à chaque pas de temps) :

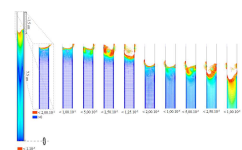
1. Calcul des nouvelles coordonnées des nœuds à la surface de la tranchée, fonction de la vitesse de dépôt calculée et de l'orientation du vecteur normal des segments qui relient chacun des nœuds avec ses 2 plus proches nœuds de surface voisins.
2. Adaptation de la position des nœuds sur le nouveau profil de tranchée calculé.
3. Mouvement des nœuds de surface depuis les coordonnées du profil de tranchée courant vers les coordonnées adaptées du nouveau profil de tranchée.
4. Déformation des limites latérales du volume source qui surplombe la tranchée (déformation verticale).
5. Re-maillage local et lissage des cellules du maillage en volume afin de conserver une bonne qualité de maillage jusque la fermeture de la tranchée simulée.



Procédure d'interconnexion des deux échelles de simulation et modélisation à une échelle intermédiaire (mésoscopique)

- Spécificité : Il s'agit de niveaux d'échelle où les effets de rarefaction commencent à influencer l'écoulement. Les conditions limites classiques ('no-slip') sur la vitesse et la température du fluide le long des parois sont sujettes à modifications dans le but d'incorporer la réduction d'échange de quantité de mouvement et d'énergie avec les molécules avoisinantes. Dans ce cas, les équations hydrodynamiques classiques peuvent être employées seulement accompagnées de conditions limites spécifiques sur la température et la vitesse tangentielle implémentées le long des parois du domaine d'écoulement considéré.
 - Intérêt : pour les cas où les motifs de tranchées manquent d'uniformité de distribution sur la plaque (effets de micro-charge). A plus court terme, dans le cadre du développement de notre stratégie de modélisation multi-échelles, ces simulations à des niveaux d'échelle intermédiaires permettent l'évaluation de critères d'arrêt de simulation à une échelle donnée et de critères de transmissions d'information d'une échelle à l'autre (analyse de sensibilité, évaluation du niveau de couplage entre les modèles de tranchée et de réacteur) mais aussi l'analyse des conditions limites du volume source à l'échelle de la tranchée.

Hydrodynamique à l'échelle Inter-plaques [Kn~0,02 - Slip Flow]



CONCLUSIONS / PERSPECTIVES

(...)

