

Thèse présentée à Aix-Marseille Université pour obtenir le grade de  
docteur ès sciences

Ecole doctorale : Physique et Science de la Matière

Spécialité : Optique, Photonique et Traitement d'Image

## **Métrie des dimensions critiques : scatterométrie et développements avancés**

Alexandre Vauselle

19 décembre 2013

STMicroelectronics, CRD – Rousset

Institut Fresnel, équipe DIMABIO – Marseille

### **Membres du jury**

Frédéric Lalande	Président du jury
Jean Marc Frigério	Rapporteur
Isabelle Schanen	Rapporteur
Carole Deumié	Directrice de thèse
Gaëlle Georges	Co-directrice de thèse
Philippe Maillot	Encadrant industriel



A Sabrina,  
A mes parents.



*Les espèces qui survivent ne sont pas  
les espèces les plus fortes, ni les plus  
intelligentes, mais celles qui s'adaptent le  
mieux aux changements.*

Charles DARWIN

# Remerciements

Le moment d'écrire ces lignes est arrivé, ce qui signifie la fin de ma thèse de doctorat. Ce n'est pas sans une certaine nostalgie qu'il est temps de faire un bilan sur ces quatre années qui viennent de s'écouler et de prendre conscience de l'aide reçu. En effet, sans une multitude de contributions, ces travaux n'auraient jamais abouti.

En premier lieu, je souhaiterais remercier les différents membres de mon jury. Un immense merci aux rapporteurs, Mme Isabelle Schanen et M. Jean Marc Frigério pour avoir pris le temps d'étudier le manuscrit. Merci à M. Frédéric Lalande d'avoir accepté d'être le président du jury.

Je tiens à remercier Jean-Michel Mirabel, responsable du département Recherche et Développement de STMicroelectronics à Rousset, pour m'avoir donné la chance de travailler dans l'une de ses équipes.

Je souhaiterais remercier les directeurs de l'Institut Fresnel qui se sont succédés, Hugues Giovannini puis Stephan Enoch, pour leur accueil dans le laboratoire et pour m'avoir permis de travailler dans de très bonnes conditions. Merci également à Mireille Commandré pour mon intégration au sein de son équipe. Je remercie particulièrement Carole Deumié pour avoir dirigé ces travaux de recherche. J'exprime toute ma gratitude à mes co-encadrants, ma co-directrice de thèse Gaëlle Georges pour son implication, son savoir et sa patience et Philippe Maillot, encadrant industriel, pour m'avoir transmis une infime partie de son expertise en métrologie.

Je remercie l'ensemble des ingénieurs et techniciens qui ont contribué à la création des échantillons. Un grand merci à Philippe Dreux pour m'avoir fourni les réseaux périodiques. Les dépôts CVD ont été réalisés grâce à Karen Labory et Eurielle Joly et les dépôts par four de diffusion par Laurent Brun et Benoist Ricard. Pour les

étapes de photolithographie, je remercie Jean Fortin, Jérôme Azémar et surtout Laudine Paci. Sa contribution a été primordiale pour la réalisation de ces travaux de thèse et son support est quotidien dans mon nouveau poste. Concernant la gravure, je remercie Sandrine Clément, Yoann Goasduff, Nathalie Crousier, Romain de Paris et Marylaine Nguyen.

Je remercie chaleureusement l'ensemble de l'équipe Métrologie dirigée par Nicolas Pic. Merci beaucoup à ce dernier d'avoir pris du temps pour corriger le chapitre 2. Merci à Emilienne Roisin (qui a changé de service entre temps), Julien Martinez, Vincent Toucas, Anne-Marie Dubois, Véronique Tiano, Valérie Reboul et Frederic Puletti.

Ces travaux n'auraient pu être réalisés sans l'aide des opérateurs et techniciens de production, notamment Nicole Poupeau et Anne Marie Kletzen, qui m'ont laissé l'accès aux équipements et ont passé mes lots.

Il est également impossible de ne pas citer l'ensemble des thésards et stagiaires côtoyés durant ces toutes ces années. Tant de pauses, de discussions diverses et variées et de soirées que j'ai ratées. Un grand merci à Julien et Aurélie avec qui j'ai traversé cette épreuve dans son intégralité. Merci également à Emilie, tes conseils ont toujours été judicieux et précieux (enfin à l'heure où j'écris ces lignes je n'ai toujours pas été dans le caisson de flottaison...). Un immense merci à Abdel pour tous les cafés, je crois que je te dois une plantation entière ! Merci à Kévin, Anthony, Jordan, Jonathan et Bertrand pour votre bonne humeur, vous avez permis que je travaille dans les meilleures dispositions !

Je tiens à remercier Delphine Maury pour m'avoir accepté dans son équipe durant plus de cinq mois en tant qu'ingénieur process integration. Grâce à toi, j'ai pu finir sereinement mes travaux de thèse tout en travaillant sur des sujets passionnants en découvrant une vision plus générale de la fabrication de composants. Sous la responsabilité d'Anne-Hélène Conilh et travaillant en équipe avec Bernadette Gros, je m'épanouis pleinement. L'aboutissement de cette collaboration est sa poursuite en contrat post doctoral pour au moins un an. Merci à toute l'équipe Process Integration pour son accueil chaleureux et l'aide apportée pour que je sois autonome le plus rapidement possible. Merci à Stephan Niel, Eric

Bardet, Antonina Solere, Beatrice Boutemy, Julie Bruno, Virginie Bidal, Stéphane Bégouin, Pierre-François Ogier, Franck Julien, Hélène Dalle-Houliez et Arnaud Régnier. Pour toutes les démarches administratives, je remercie Jeanine Reyes.

Je tenais à finir cette partie sur les personnes de ST en remerciant une dernière fois certaines personnes qui ont été absolument indispensables à la réalisation de cette thèse. Philippe Maillot, Yoann Goasduff, Laudine Paci, Marylaine N’Guyen et Julien Martinez, je voulais vous remercier pour le temps que vous avez pris à m’expliquer votre métier avec passion et intérêt. Ce sera toujours un plaisir de travailler avec vous. J’ajouterais une mention particulière à mes « collègues de piscine », Romain de Paris et Stéphane Bégouin pour les kilomètres passés à nager avec entrain et motivation !

Je souhaite remercier Guillaume Blavier et Stéphanie Kremer de la société KLA-Tencor pour leurs supports techniques indispensables sur la scatterométrie et l’ellipsométrie.

A propos du personnel de l’Institut Fresnel, ma reconnaissance éternelle va envers Nelly Bardet pour la résolution de tous mes problèmes administratifs et pour toutes les discussions que nous avons pu avoir. D’un point de vue purement informatique, je n’aurais jamais pu travailler, calculer et même « apprécier » Linux sans l’expertise et la sympathie de Frédéric Forestier. Je remercie l’ensemble du personnel administratif pour sa volonté de faciliter les démarches des doctorants au maximum.

Je souhaiterais remercier Jean-Pierre Spinelli, qui nous a quitté bien trop tôt. Un immense merci pour nos longues discussions et pour la réalisation des nombreuses pièces mécaniques nécessaires à mon banc de mesures.

Un grand merci à l’ensemble de l’équipe MAP<sup>2</sup>, dirigé par Mireille Commandré, équipe qui s’est scindée en plusieurs parties durant ma thèse. Un grand merci à Laurent Gallais, Jean-Yves Natoli de la nouvelle équipe ILM. Un immense merci aux membres permanents de l’équipe DIMABIO, dirigée par Carole Deumié :



Anabela Da Silva avec qui j'ai partagé mon bureau durant deux ans, Laure Siozade-Lamoine et Gaëlle Georges.

Que dire de toutes les belles rencontres réalisées au cours de mon passage à l'institut Fresnel. S'il ne fallait en garder qu'une, ce serait certainement Romain Burla qui est devenu un ami. Mais, je ne peux pas oublier tous les moments passé avec tous les étudiants, doctorants et post doctorants rencontrés dans les diverses équipes de l'institut : Olivier Casadessus, Césaire N'Diaye, Céline Gouldieff, Marie Lécureux, Marc Fabert, Dam-Bé Douti, Alexandre Joerg, David Petiteau, Pascal Berto, Guillaume Demesy, Benjamin Vial et Simon Rehn.

Que serais-je devenu sans un soutien toujours inconditionnel mais souvent moqueur de mes amis ? Ce sont également eux qui me font progresser et avancer chaque jours (notez-le, je ne le répéterais pas tous les jours !). Merci à tous mes amis que je côtoie régulièrement, Aurélie et Manu que je connais maintenant depuis l'école d'Ingénieur, Toun et Maman, Juliette et Jawad. Il ne faut pas oublier le futur meilleur docteur en médecine que je connaisse (bon, d'accord, je n'en connais pas d'autre) Tibal que je me dois de remercier pour l'ensemble de son œuvre. Merci aux docteurs Keke Leuleu, Mou et Jordou et à la futur doctoresse Fanny : courage c'est bientôt la fin !

Il est nécessaire de remercier chaque personne qui a compté durant ces travaux. D'une manière évidente, les amis de « Grenoble » ont contribué à leur façon à soulager mon esprit lors de nombreux week end de randonnées hasardeuses et dangereuses ou de week end découverte comme à Lyon ou de week end aux skis. Comment ne pas remercier pour tous ces moments exceptionnels T<sup>2</sup>, Sarah, Coin-Coin, Barbu, Marie, Danvert, Fred Planche, Barbara et Padilla. A noter que j'aimerais à l'avenir que Danvert suive une thérapie pour lutter contre sa pyromanie.

Un autre groupe d'amis a compté énormément durant ces quatre dernières années, ceux que je qualifierais de « Saint Nazaire ». Merci à vous tous, on ne se voit pas souvent mais c'est toujours exceptionnel ! Ne changez jamais, vous êtes géniaux. Je commencerais par remercier Biz pour m'avoir permis d'être son témoin lors de son mariage avec Anne-Cha, qui fut l'évènement le plus heureux de l'année 2012.

Merci à Papin, Clémence, Biquet, Claire, Julien et Ghislain. Tous ces moments passés avec vous sont gravés dans ma tête et j'ai hâte de vous revoir ! Félicitations à Elsa et J.B pour la naissance de la petite Nora, ainsi qu'à Cyril et Palmyre pour la naissance de Loïs. Merci à Toublanc, Magali et leur fils Johann pour votre bonne humeur et votre joie de vivre. Merci à Maëlle et Adri pour tout (les soirées, les vacances à Brest, etc...).

Il y a quelqu'un qui irrémédiablement a eu un effet bénéfique sur mon travail et que je devais remercier à part. Une incommensurable merci à Marco, bien plus qu'un colocataire, c'est un ami de plus de 10 ans. Merci pour tout. Il serait trop long de tout détailler mais avec Manu et Aurélie, vous avez toujours été présents dans le moment difficile comme dans les meilleurs. Vous êtes de belles personnes, merci.

Nous arrivons à la fin de ces remerciements que je ne pensais pas si long quand j'ai commencé à les écrire. Je voudrais maintenant remercier ma famille. En premier lieu, que serais-je sans le soutien indéfectible de mes parents. Dans tous mes choix, ils ont toujours été d'accord et optimiste. Merci à vous, je vous aime. J'aimerais également remercier mon grand frère pour nos longues discussions et franche rigolade jusqu'au petit matin. Merci à ma belle-sœur Tatouille et mes deux magnifiques neveux Tom et Charlie. Pour l'ensemble de sa cuisine au beurre, sa générosité et sa bonne humeur, merci à Mamie.

Pour conclure, et parce qu'elle doit se dire en ce moment que je l'ai oublié, je remercie la personne qui partage ma vie depuis deux ans maintenant. En espérant que cela continue encore longtemps, je remercie Sabrina de m'avoir soutenu sans relâche même lorsque je doutais. Merci mon amour, il est évident que sans toi, je n'y serais jamais arrivé !

Avec le recul, et après avoir fini d'écrire ces remerciements, j'en arrive à une seule conclusion : seul, on n'est finalement rien. A vous tous qui avez partagé ma vie durant ces dernières années et fait de moi ce que je suis, simplement merci.

# Table des matières

Remerciements .....	i
Table des illustrations .....	ix
Table des Tableaux .....	xiv
Introduction .....	1
Chapitre 1 : Introduction aux techniques de fabrication : dépôt, photolithographie et gravure .....	7
Introduction .....	9
1.1 Dépôts de couches minces.....	11
1.1.1 Grille en silicium poly-cristallin.....	11
1.1.2 Dépôt de TEOS (TétraEthOxySilane) au niveau des contacts électriques .....	13
1.2 Photolithographie [5] .....	15
1.2.1 Dépôts des couches d'antireflet et de résine.....	15
1.2.2 Exposition et développement.....	16
1.2.3 Application .....	18
1.3 Gravure sèche ou gravure plasma .....	19
1.3.1 Principe .....	20
1.3.2 Concurrence des réactions et polymérisation.....	21
1.3.3 Espèces réactives .....	22
1.3.4 Détection de fin de gravure .....	23
1.3.5 Applications .....	24
1.4 Gravure humide .....	26
1.5 Gestion de la fabrication d'un échantillon spécifique .....	27
Conclusion.....	28
Chapitre 2 : Outils de Métrologie .....	29

Introduction .....	31
2.1 Dispersion et répétabilité.....	31
2.2 Mesures à base d'instruments imageurs .....	32
2.2.1 Microscopie optique .....	32
2.2.2 Microscopie électronique à balayage.....	33
2.2.3 Microscopie à force atomique.....	35
2.2.4 Mesures par microscopie électronique après coupe .....	38
2.3 Techniques de reconstruction par inversion .....	39
2.3.1 Ellipsométrie spéculaire.....	40
2.3.2 Scatterometrie .....	49
2.4 Autres techniques .....	52
Conclusion.....	53
Chapitre 3 :            Applications de l'ellipsométrie et de la scatterometrie pour la caractérisation de structures géométriques .....	55
Introduction .....	57
3.1 Etude et caractérisation de nanocristaux de silicium .....	58
3.1.1 Nanocristaux seuls .....	59
3.1.2 Nanocristaux recouverts de nitrure de silicium .....	63
3.1.3 Conclusion.....	64
3.2 Caractérisation de la couche d'oxyde natif sur silicium poly-cristallin .. .....	65
3.3 Mesures de lignes de silicium poly-cristallin.....	68
3.3.1 Mesures par microscopie électronique à balayage.....	69
3.3.2 Mesures par microscopie électronique à transmission.....	70
3.3.3 Mesures par scatterometrie .....	71
3.3.4 Conclusion.....	73
3.4 Mesures de trous de contacts.....	74
3.4.1 Etude de faisabilité sur échantillons en TEOS .....	74

3.4.2 Etude de sensibilité des variations géométriques.....	91
Conclusion.....	104
Chapitre 4 : Détermination de la rugosité sur des réseaux périodiques par analyse multi-échelle .....	105
Introduction .....	107
4.1 Diffusion lumineuse et principe de l'accès aux paramètres de rugosité de réseaux périodiques .....	108
4.2 Méthodes de résolution des équations de Maxwell.....	113
4.2.1 Méthode différentielle .....	114
4.2.2 Approximation du premier ordre .....	126
4.2.3 Généralisation à une surface idéale quelconque .....	136
4.3 Résultats expérimentaux.....	154
4.3.1 Analyse multi-échelle.....	154
4.3.2 Cas d'une surface rugueuse.....	157
4.3.3 Résultats réseau rugueux avec méthode hybride .....	162
Conclusion.....	164
Conclusions et Perspectives.....	166
Références .....	168
Acronymes .....	177

## Table des illustrations

Figure 0-1 : Loi de Moore représentant l'évolution par année du nombre de composants sur une puce.....	2
Figure 1-1 : a) Vue schématique d'un transistor complet, avec les premières lignes de métal (en transparence, on aperçoit les contacts), b) Vue en coupe [3]. .....	9
Figure 1-2 : Plaques de silicium de diamètre 200 mm, crédit photo : S. Joubert, STMicroelectronics. ....	10
Figure 1-3 : Schéma de présentation d'un four vertical de dépôt.....	12

Figure 1-4 : Schéma d'un équipement permettant la génération d'un plasma. ....	14
Figure 1-5 : Dépôt de BARC par spin coating. ....	16
Figure 1-6 : Schéma de principe d'un scanner. ....	17
Figure 1-7 : Empilement après l'étape de photolithographie, a) « grille », b) « contact ». ....	19
Figure 1-8 : Passivation par polymérisation, a) re-déposition des polymères, b) passivation, c) bombardement ionique anisotrope, d) gravure chimique sélective [7]. .....	22
Figure 1-9 : Images CDSEM, a) après photolithographie, b) après gravure. ....	26
Figure 2-1 : Exemples de mesures de contacts électriques pour différents CD après photolithographie ; a) CD = 168 nm, b) CD = 184,4 nm, c) CD = 126,6 nm, d) CD = 368,3 nm. ....	34
Figure 2-2 : Mesure de lignes de silicium poly-cristallin par AFM, sur une fenêtre de 1 x 1 $\mu\text{m}$ avec une résolution de 512 x 512 points. ....	37
Figure 2-3 : Vue de contacts électriques réalisée par, a) SEM; b) TEM. ....	39
Figure 2-4 : Schéma représentant la réflexion et la réfraction dans le plan d'incidence. ....	42
Figure 2-5 : Ellipsomètre à extinction. ....	43
Figure 2-6 : Ellipsomètre avec un élément tournant. ....	44
Figure 2-7 : Schéma de principe du banc d'ellipsométrie présent à l'Institut Fresnel. ....	45
Figure 2-8 : Exemple de mires d'overlay. ....	53
Figure 3-1: Image CDSEM d'une couche de nanocristaux, a) tiltée à 40 °, b) vue de dessus. ....	58
Figure 3-2 : Empilement étudié a) présentant des nanocristaux de silicium, b) Empilement équivalent pour l'ellipsométrie. ....	59
Figure 3-3 : Cartographie des points de mesures sur un wafer 200 mm, employée pour les mesures d'ellipsométrie. ....	60
Figure 3-4 : Paramètres ellipsométriques en fonction de la longueur d'onde, en noir la courbe calculée, en rouge la courbe mesurée, pour l'empilement complet. ....	61
Figure 3-5 : Empilement avec oxyde de silicium natif sur niveau de grille. ....	66
Figure 3-6 : Etude de vieillissement d'une couche de silicium poly-cristallin. ....	67

Figure 3-7 : Schéma de l'empilement de la structure de silicium poly-cristallin sur oxyde de silicium.....	69
Figure 3-8 : Mesure de la grille a) en résine photosensible après photolithographie, b) en silicium poly-cristallin après gravure. Images CDSEM.....	69
Figure 3-9 : Visualisation de la zone de mesure appelée MESDIM 13. ....	70
Figure 3-10 : Coupe d'une ligne de silicium poly-cristallin vue par microscopie électronique à transmission. ....	71
Figure 3-11 : Zoom sur la zone Mesdim19 mesurée par microscopie électronique à balayage. ....	75
Figure 3-12 : Image obtenue par microscopie électronique à balayage d'un réseau de contact gravé sur un échantillon de TEOS. ....	77
Figure 3-13 : Partie réelle de l'indice mesuré sur la couche en TEOS (avant l'étape de photolithographie) en fonction de la longueur d'onde. ....	78
Figure 3-14 : Epaisseur relevée sur trois plaques de la couche de TEOS. ....	79
Figure 3-15 : Cartographie des zones de mesures sur un wafer 200 mm en scatterometrie. ....	79
Figure 3-16 : Modèle initial de l'empilement TEOS sur silicium cristallin. ....	80
Figure 3-17 : GOF pour une mesure de scatterometrie (Wafer 1). ....	81
Figure 3-18 : Coupe TEM dans une mire constituée de trous de contact et destinée à des mesures de scatterometrie, à g. : au centre de la plaque, à d. : en bord de wafer. ....	84
Figure 3-19 : Formes géométriques du bord d'un demi-contact selon les différentes recettes de mesures (standard, optimisée en GOF et en temps de calcul, et celles permettant le meilleur compromis (optimisées 1 et 2)). ....	90
Figure 3-20 : Positionnement des champs mesurés.....	91
Figure 3-21 : Valeurs des CD « bas » mesurés par CDSEM au sein des mires scattérométriques.....	93
Figure 3-22 : Coupe TEM d'un contact non débouchant : à g. vue d'ensemble, à d. zoom sur la partie inférieure. ....	95
Figure 3-23 : Empilement et forme constituant les trous de contacts de la mire scatterometrie dédiée à la structure étudiée. La figure indique les matériaux et leur épaisseur (en nm). ....	98

Figure 3-24 : Valeurs du GOF pour chaque point de mesure. ....	99
Figure 3-25: Epaisseur des différentes couches pour les 31 points de mesures.....	99
Figure 3-26 : Cartographie des points de mesures sur un wafer 200 mm en scatterometrie. ....	100
Figure 3-27 : Tests de répétabilité, trois séries de 10 mesures réalisées trois jours consécutifs. ....	101
Figure 3-28 : Coupes TEM de la mire scattérométrique en centre plaque, à g. : Vue d'ensemble, à d. agrandissement sur la couche de nitrure (en gris foncé) et la couche de siliciure de cobalt (en noir). ....	102
Figure 4-1 : Exemple de ligne de silicium poly-cristallin impactée par de la rugosité de bords de ligne (vue de dessus obtenue par CDSEM). ....	107
Figure 4-2 : Diffusomètre angulairement résolu. ....	109
Figure 4-3 : Dynamique de mesure entre un échantillon lambertien totalement diffusant et le niveau de bruit (mesure sans échantillon) dans le cas d'un faisceau incident parallèle et focalisé. ....	111
Figure 4-4 : Intensité diffusée par un réseau rugueux blasé de période 600 lignes/mm. ....	111
Figure 4-5 : Impact de la rugosité sur l'amplitude de la diffusion lumineuse, la rugosité est exprimée en pourcentage de l'amplitude du réseau [67]. ....	112
Figure 4-6 : Définition du repère. ....	115
Figure 4-7 : Empilement quelconque pour la définition des variables pour l'algorithme des matrices S [70]. ....	120
Figure 4-8 : Exemple de découpage d'un réseau de hauteur h en trois tranches d'égale hauteur. ....	122
Figure 4-9 : Profil rugueux aléatoire. ....	124
Figure 4-10 : Intensité diffusée par deux surfaces de rugosité de l'ordre de 1 Å et 10 Å. Polarisation TE et longueur d'onde égale à 632,8 nm. ....	124
Figure 4-11 : Exemple de profil sinusoïdal d'amplitude 100Å et de rugosité 10 Å. ..	125
Figure 4-12 : Intensité diffusée par deux réseaux de forme sinusoïdales, de période 900 lignes/mm, d'amplitude 100 Å, et de rugosité de l'ordre de 1 Å et 10 Å. Polarisation TE et longueur d'onde égale à 632,8 nm. ....	125
Figure 4-13 : Définition du vecteur <b><i>dM</i></b> pour un profil quelconque h. ....	127



Figure 4-14 : Décomposition géométrique d'un réseau rugueux en une partie périodique P et une partie rugueuse R.....	135
Figure 4-15 : Intensité calculée pour une surface a) parfaitement périodique de période 900 lignes/mm, b) parfaitement rugueuse. ....	145
Figure 4-16 : Comparaison des intensités diffusées pour un réseau périodique rugueux calculé par la méthode approchée au premier ordre. « $I_p$ » : intensité du réseau périodique, « $I_r$ » : intensité du profil rugueux, « $I_{p+r}$ » : intensité du réseau rugueux. ....	145
Figure 4-17 : $ E_y $ pour une surface plane d'altitude 0, de longueur 10 $\mu\text{m}$ éclairée en incidence normale par une onde incidente plane d'amplitude 1, en polarisation TE, résolution suivant la direction x 512 points, et suivant la direction z 1000 points. ...	147
Figure 4-18 : Profil rugueux d'amplitude de l'ordre de $\lambda/100$ , avec 512 points et une longueur 10 $\mu\text{m}$ .....	147
Figure 4-19 : BRDF $\cos\theta$ selon les différentes méthodes de calcul, pour une surface rugueuse de hauteur maximale de l'ordre de $\lambda/100$ , polarisation TE, incidence nulle. ....	148
Figure 4-20 : $ E_y $ pour une surface sinusoïdale d'amplitude $\lambda/80$ d'altitude 0, de longueur 10 $\mu\text{m}$ éclairée en incidence normale par une onde incidente plane d'amplitude 1, en polarisation TE, résolution suivant la direction x 512 points, et suivant la direction z 1000 points. ....	149
Figure 4-21 : Intensité diffusée (BRDF $\cos\theta$ ) selon les différentes méthodes de calcul, pour un profil périodique sinusoïdal d'amplitude $\lambda/80$ et de rugosité de l'ordre de $\lambda/100$ , polarisation TE, incidence nulle. ....	150
Figure 4-22 : Module de F et G en fonction des fréquences spatiales .....	152
Figure 4-23 : Représentation de l'intensité fournie par l'équation (4.89) comparée avec l'intensité simplifiée fournie par l'équation (4.94).....	152
Figure 4-24 : Fréquences spatiales accessibles par le diffusomètre en fonction de la longueur d'onde de la source (les mesures réalisées dans le cadre de ce travail utilisent une source à 633 nm) et accessibles par l'AFM en fonction du nombre de points (pts) et de la longueur d'un côté de la zone mesurée (considérée carrée). ...	156

Figure 4-25 : Images AFM de 40x40µm de côté et une résolution de 512x512 points pour a) oxyde de silicium, b) nitrure de silicium, c) silicium poly-cristallin, d) tungstène. ....	159
Figure 4-26 : BRDF $\cos\theta$ en fonction de l'angle de diffusion pour différents matériaux et deux types de faisceau incident (parallèle et focalisé). ....	160
Figure 4-27 : Représentation du spectre de rugosité pour les mesures de diffusion et AFM pour le silicium poly-cristallin.....	160
Figure 4-28 : Matrice de réseaux. ....	162
Figure 4-29 : Mesure AFM sur l'échantillon « STM 2 » (40 µm x 40 µm, 512 x 512 points) avec un zoom sur le réseau (10 µm x 10 µm avec une résolution de 256 x 256 points). ....	163
Figure 4-30 : Mesure d'intensité en fonction de l'angle de diffusion sur l'échantillon STM2, d'un lambertien diélectrique et du niveau de bruit. ....	163

## Table des Tableaux

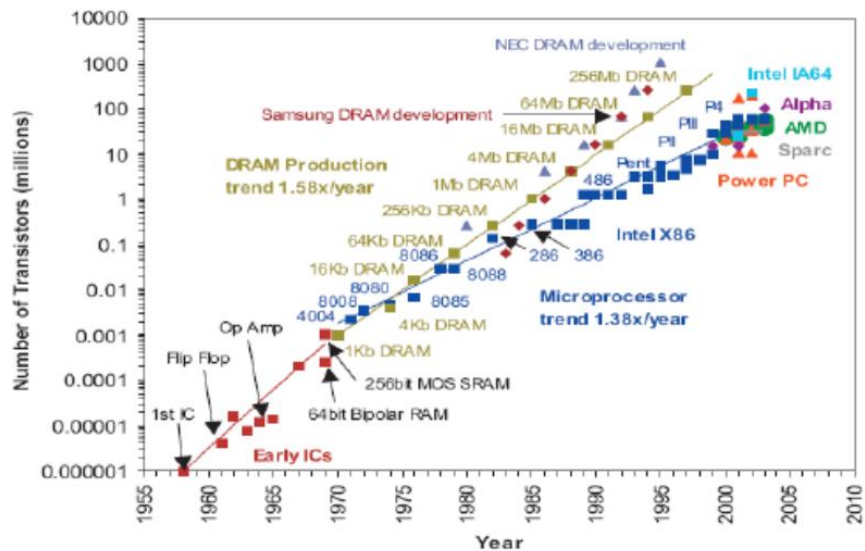
Tableau 1-1 : Procédés de fabrication du niveau "grille" en photolithographie.....	19
Tableau 1-2 : Correspondance entre matériaux à graver et réactifs possibles.....	23
Tableau 1-3 : Etapes de gravure de la grille (0, débit de gaz nul, + : débit de gaz non nul, ++ : débit de gaz plus important).....	24
Tableau 1-4 : Extrait des paramètres de gravure des contacts électriques : gravure TEOS (8 et 11) et retrait résine (14) (0, débit de gaz nul, + : débit de gaz non nul, ++ : débit de gaz plus important, +++ : débit de gaz supérieur à ++, tendance à titre indicatif). ....	25
Tableau 2-1 : Liste des équipements ellipsométriques disponibles et leurs applications.....	47
Tableau 3-1 : Calcul d'épaisseur à partir des mesures ellipsométriques, dans le cas de nanocristaux sur oxyde de silicium. ....	61

Tableau 3-2 : Données géométriques obtenues par mesures CDSEM (NC pour NanoCristaux). .....	62
Tableau 3-3 : Calculs des épaisseurs des couches de nanocristaux recouverts de SiN sur oxyde de silicium par ellipsométrie. ....	63
Tableau 3-4 : Données géométriques obtenues par mesures CDSEM pour l'échantillon Si/SiN (NC pour nanocristaux). ....	64
Tableau 3-5: Mesures par ellipsométrie d'épaisseurs d'oxyde natif sur silicium polycristallin.....	67
Tableau 3-6 : Résumé des mesures de CD et de pentes effectuées par différentes techniques de mesures.....	72
Tableau 3-7 : Relevés des CD mesurés par CDSEM sur 9 champs exposés pour trois wafers (nm).....	76
Tableau 3-8: Mesures d'épaisseurs avant l'étape de photolithographie et après l'étape de gravure.....	82
Tableau 3-9 : Diamètres mesurés selon le pourcentage de hauteur pour chaque point de mesure (slot 1), l'erreur est calculée entre la valeur à 5% de la hauteur et celle mesurée par CDSEM. ....	83
Tableau 3-10 : Comparaison des paramètres mesurés à partir de la coupe TEM avec la reconstruction par scatterometrie.....	84
Tableau 3-11 : Influence des paramètres du modèle sur la convergence .....	87
Tableau 3-12 : Impact d'une variation sur un des paramètres sélectionnés sur le temps de calcul et sur le critère de convergence (GOF).....	88
Tableau 3-13 : Recettes optimisées selon les résultats précédents.....	89
Tableau 3-14 : Mesure du CD bas et de l'épaisseur dans les mires scattérométriques selon différentes techniques (moyenne des valeurs obtenues par wafers, sauf pour le TEM). Les valeurs sont exprimées en nanomètre. ....	94
Tableau 3-15 : Bilan des écarts-type (STD pour « STandard Deviation ») selon les techniques de mesure. ....	95
Tableau 3-16 : Recette optimisée pour l'empilement de production. ....	100
Tableau 3-17: Comparaison de CD obtenu par CDSEM et scatterometrie selon les champs exposés.....	102

Tableau 3-18 : Comparaison des résultats de CD et d'épaisseur obtenus par coupe TEM et par scatterometrie (moyenne de 9 mesures aux mêmes points).....	103
Tableau 4-1 : Rugosités obtenues à partir des mesures des surfaces planes par diffusion et par AFM. ....	161

# Introduction

Les procédés de fabrication dans le domaine de la microélectronique sont en évolution permanente. Ceci est la conséquence directe de la course perpétuelle dans laquelle est engagée cette industrie pour le développement de composants toujours plus performants avec des dimensions de plus en plus petites. Afin d'améliorer ces performances, le nombre de transistors par composant a doublé tous les deux ans de façon constante durant les trente dernières années, suivant avec une certaine précision les prédictions énoncées par Moore en 1965 [1], [2] (comme représenté en Figure 0-1). Afin d'émettre des spécifications et de guider les fabricants de composants microélectroniques et nanoélectroniques à surmonter les défis que constituent chaque avancée technologique, l'ITRS (International Technology Roadmap for Semiconductors), constitué d'un groupement d'experts représentant l'ensemble des acteurs du secteur, édite tous les deux ans depuis quinze ans des recommandations sur les dimensions des composants à atteindre. L'ensemble de ce rapport sert de base de travail et propose des solutions tant au niveau des procédés de fabrication qu'au niveau des techniques de métrologie qui leur sont associées. En effet, avec des dimensions de plus en plus petites, les méthodes de caractérisation font face à de grands défis technologiques. Comme illustration, si l'on s'intéresse aux spécifications recommandées pour la mémoire flash et notamment aux lignes de silicium poly-cristallin qui en constitue un élément clé : pour 2013, l'ITRS recommande un contrôle par microscopie électronique à balayage avec une dispersion de 2,1 nm. A noter que pour 2024, la valeur recommandée sera de 0,7 nm.



**Figure 0-1 : Loi de Moore représentant l'évolution par année du nombre de composants sur une puce.**

Sur le site de Rousset de STMicroelectronics, sont développées majoritairement les technologies des circuits CMOS (Complementary Metal Oxide Semiconductor) appliquées aux mémoires non-volatiles embarquées. En plus de posséder de faibles dimensions, ces structures complexes sont très dépendantes des fluctuations des procédés de fabrication. La métrologie doit être capable de quantifier des variations infimes dans les procédés de fabrication afin d'agir sur les paramètres de régulation. Ceci est la base du contrôle des procédés (ou process control en anglais) qui régit la production de composants et où la métrologie devient un acteur primordial.

Les techniques par microscopie électronique à balayage sont largement présentes sur les lignes de production mais elles présentent l'inconvénient de mesurer seulement en vue de dessus et de réaliser des mesures très localisées sur des fenêtres inférieures à  $2 \mu\text{m}^2$ . Parmi les techniques jugées les plus prometteuses et dont l'effort de mise au point en contexte industriel est souligné par l'ITRS, la scatterométrie est fortement recommandée.

La scatterométrie est une technique optique non destructive qui permet d'extraire les paramètres géométriques d'un profil avec une très bonne précision. Elle est basée sur des techniques de reconstruction numérique à partir d'une

illumination et de mesures en champ lointain. Par rapport aux techniques classiquement utilisées dans l'industrie de la microélectronique (principalement par microscopie), elle présente l'avantage :

- d'être une technique de mesure en champ lointain, particulièrement adaptée pour des mesures en ligne au cours de la fabrication ;
- de nécessiter une instrumentation simple et rapide, ce qui permet un suivi en temps réel ;
- d'être capable d'extraire des dimensions latérales inférieures à 100 nm avec une répétabilité inférieure à 1 nm.

Cette technique permet déjà de reconstruire des structures périodiques monodimensionnelles dans des cas standards. Toutefois d'autres enjeux demeurent actuellement.

En effet, il apparaît qu'avec la miniaturisation des composants, il s'avère nécessaire de contrôler d'autres paramètres, tels que la pente ou la rugosité des profils (LER, Line Edge Roughness). Aux petites échelles, ces paramètres peuvent modifier les propriétés électriques des composants. Les rugosités de bord de ligne peuvent par exemple être corrélées à une augmentation du courant de fuite des transistors. De plus, une caractérisation unidimensionnelle est souvent insuffisante et il est nécessaire d'étudier des structures bidimensionnelles complexes, comme par exemple les matrices de trous de contacts.

Ces travaux de recherche ont été réalisés dans le cadre d'une convention CIFRE (Conventions Industrielles de Formation par la Recherche) entre l'Institut Fresnel et la société STMicroelectronics. Ils font suite à une autre thèse de doctorat qui a permis dans un premier temps de développer un code de simulation de l'intensité diffractée par un profil tridimensionnel quelconque. Ce premier code a permis de simuler l'interaction d'une onde incidente avec des structures périodiques ou aléatoires, et donc de prendre en compte les rugosités de lignes et de parois. Ceci a permis de mettre en évidence les conditions expérimentales à mettre en œuvre pour accéder aux paramètres de rugosité. Dans le cadre de ce travail de doctorat, nous nous sommes attachés à développer un code approché, qui permet à partir des mesures de diffusion angulaire, d'extraire les propriétés de rugosité.

Ce travail a été réalisé pour sa plus grande partie en milieu industriel, dans les locaux de la société STMicroelectronics. Il a nécessité le suivi de nombreux temps de formation, de manière à être capable de gérer en totale autonomie des lots d'échantillons, que ce soit pour en demander la fabrication ou pour les extraire en cours de fabrication pour les mesurer. Il est en effet nécessaire à ce stade, pour intégrer les équipes et proposer des innovations en matière de métrologie, de savoir générer et exploiter par soi-même les processus de fabrication ou de mesure, appelés « recettes » et contenant l'ensemble des paramètres du procédé. De plus, si la plus grande partie de ce travail a porté sur une approche de métrologie innovante, de nombreuses périodes pendant cette thèse ont été consacrées à un investissement à proximité des équipes dans le cadre de développements plus industriels, qui ne seront pas présentés dans ce document.

Le premier chapitre de ce mémoire est consacré à une présentation non exhaustive des procédés de fabrication mis en œuvre dans le domaine de la microélectronique, ciblée plus spécifiquement sur ceux qui seront utilisés pour réaliser les dispositifs qui feront l'objet de ces travaux. Il est, en effet, important de garder à l'esprit que la réalisation de composants électroniques est complexe et nécessite des centaines d'étapes de fabrication. Plusieurs techniques de dépôt seront présentées ainsi que les principes de la photolithographie et des gravures plasma et chimique.

Le second chapitre présente les principales techniques mises en œuvre en métrologie pour la caractérisation physique des matériaux en se focalisant plus particulièrement sur la microscopie électronique et les techniques basées sur la scatterométrie ou l'ellipsométrie. Pour chacune, une présentation sera suivie d'exemples de mesures réalisées en production. Leurs limitations seront également abordées.

Des études plus poussées réalisées sur des échantillons innovants seront présentées dans le troisième chapitre. Une technique de mesure par ellipsométrie



de couches de nanocristaux de silicium est présentée ainsi qu'une étude de faisabilité sur la détection d'oxyde de silicium natif sur une couche en silicium polycristallin. Des applications à la technique de scatterometrie seront introduites avec des mesures à deux, puis trois dimensions sur des échantillons périodiques. Dans le premier cas, les mesures seront réalisées sur un réseau de lignes de silicium polycristallin et dans le cas tridimensionnel, sur des réseaux de contacts électriques.

Enfin, le dernier chapitre présente le développement d'une méthode innovante de mesure de rugosité. Cette technique s'appuie sur une mesure de diffusion lumineuse, dont l'analyse a été développée spécifiquement pour les surfaces périodiques. Une nouvelle approche se basant sur des modèles connus a été développée pour déterminer la rugosité sur des réseaux périodiques, le but étant de mesurer les mêmes structures que celles utilisées pour la scatterometrie.



# **Chapitre 1 : Introduction aux techniques de fabrication : dépôt, photolithographie et gravure**



## Introduction

Ce premier chapitre présente les procédés de fabrication étudiés pour la conception des échantillons utilisés durant l'ensemble de ces travaux de doctorat. Il n'a pas la prétention de réaliser une présentation exhaustive. Ces techniques s'appuient sur les procédés et les équipements disponibles sur le site de Rousset de STMicroelectronics.

La fabrication de composants microélectroniques est basée sur une succession de dépôts de couches minces, subissant différents traitements. Par exemple, pour réaliser un transistor, pas moins de trois cents étapes de fabrication sont nécessaires. La Figure 1-1a) présente une vue simplifiée d'un transistor avec en transparence la ligne de silicium poly-cristallin, trois cylindres représentant les contacts électriques entre les lignes de métal et la source, le drain et le silicium poly-cristallin. On retrouve ces différents éléments sur la vue en coupe de la Figure 1-1b). Pour ce faire des dépôts de différents matériaux sont nécessaires mais pas suffisants. De nombreuses techniques sont employées pour constituer des structures géométriques simples qui rempliront différentes fonctions (isolation ou conduction électrique,...).

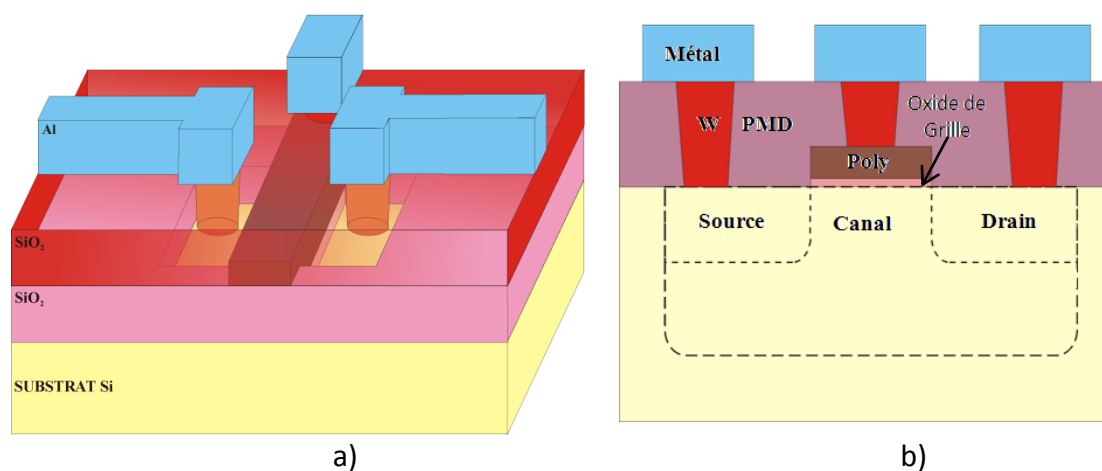


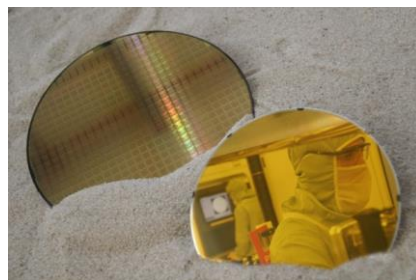
Figure 1-1 : a) Vue schématique d'un transistor complet, avec les premières lignes de métal (en transparence, on aperçoit les contacts), b) Vue en coupe.

Les principales étapes de fabrication s'enchainent généralement dans l'ordre suivant :

1. un dépôt d'une couche uniforme de matériau ;
2. une implantation ionique (pour modifier les propriétés électriques du matériau) ;
3. une étape de photolithographie ;
4. une étape de gravure ;
5. un nettoyage.

Les structures étudiées se concentrent sur les lignes de silicium polycristallin constituant la partie supérieure du transistor, appelées « grille » et les ouvertures cylindriques permettant les contacts électriques entre le transistor et les lignes métalliques, appelées « contacts » par la suite.

Le support de la création des composants électroniques est une plaque de silicium monocristallin (également désignée par le terme anglais « wafer ») dont le diamètre, l'orientation cristalline et le dopage intrinsèque varie selon les unités de production. Dans notre cas, les échantillons ont été réalisés sur des plaques de 200 mm. Un exemple de wafer est donné en Figure 1-2. On y voit une plaque ayant subi différentes étapes de gravure puisque des motifs correspondant à des puces y sont présents. Le wafer de droite est par contre vierge de toute gravure.



**Figure 1-2 : Plaques de silicium de diamètre 200 mm, crédit photo : S. Joubert, STMicroelectronics.**

On présente ici les différentes techniques influençant les paramètres géométriques des structures (taille, rugosité...) qui seront étudiés dans ce travail. Les autres étapes,

bien que primordiales pour le bon fonctionnement des composants (en particulier l'implantation ionique), ne seront pas détaillées.

## **1.1 Dépôts de couches minces**

### **1.1.1 Grille en silicium poly-cristallin**

Plusieurs techniques de dépôt ou de croissance de couches existent, utilisées ou non selon la nature et l'épaisseur des matériaux. La plupart de ces procédés de fabrication sont déployés dans des fours dédiés, utilisant des techniques de dépôt chimique en phase vapeur à basse pression, nommées Low Pressure Chemical Vapor Deposition, (LPCVD) [3]. Les fours présents sur le site de Rousset sont des fours verticaux permettant le traitement de 6 lots de 25 plaques (Figure 1-3). Il est important de pouvoir disposer d'une grande capacité car le temps de cycle est d'environ cinq heures. Ce temps comprend les rampes de montée en température, le dépôt et le refroidissement des wafers.

La grille de transistor est composée de la superposition d'un oxyde de silicium fin et d'une couche de silicium poly-cristallin plus épaisse. Du fait de la disponibilité des lignes des gaz, les deux dépôts sont réalisés dans des fours distincts. Néanmoins, tous les équipements utilisés sont des fours verticaux de marque TEL. Les paramètres qui doivent être contrôlés sont :

- la température ;
- la pression ;
- les débits de gaz pour optimiser la qualité de la couche de matériau.

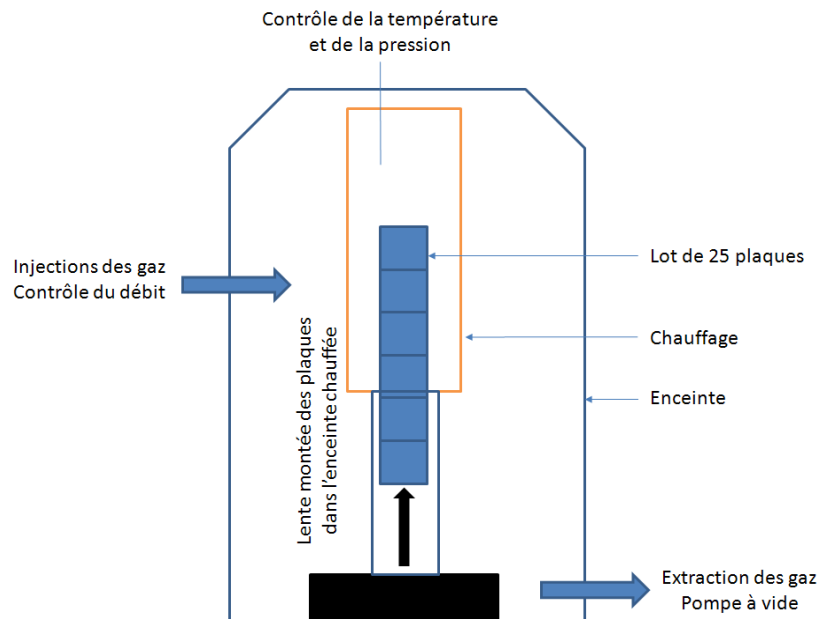
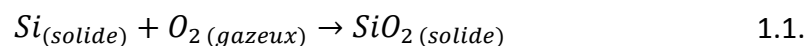


Figure 1-3 : Schéma de présentation d'un four vertical de dépôt.

La température au niveau des plaques évolue lentement depuis la température ambiante aux alentours de 20°C pour atteindre celle du réacteur entre 800 et 1200°C selon le procédé.

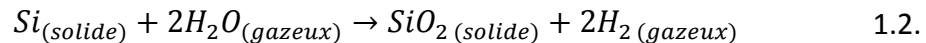
La couche d'oxyde est réalisée par croissance. Il existe deux possibilités. La première est une croissance dite « sèche », réalisée à 925 °C par l'introduction d'un mélange de diazote et de dioxygène. Le débit de dioxygène utilisé lors de la phase de dépôt est de 12 slm (pour standard liters per minute, 1slm = 1.68875 Pa.m<sup>3</sup>.s<sup>-1</sup>). La croissance de la couche est le produit de la réaction d'oxydation entre le dioxygène et le silicium monocristallin de la plaque :



Cette réaction est lente et contrôlée. L'oxyde généré est dense et sans impureté. Cette technique est préférentiellement utilisée pour les croissances d'oxyde de grille. C'est donc ce type de réaction que nous avons sélectionné pour la création des échantillons.

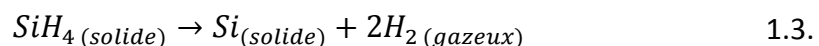


La deuxième technique est dite « humide ». La croissance est réalisée à une température de 1200°C par l'introduction d'un mélange N<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>. La réaction à cette température entre le diazote et le dihydrogène génère de la vapeur d'eau, qui va réagir avec le silicium de la plaque :



Cette réaction est beaucoup plus rapide, et la densité de l'oxyde sera plus faible. Ce type de réaction sera majoritairement utilisé pour la croissance d'oxyde sacrificiel ou présent sur l'ensemble de la plaque. Pour les deux types de réactions, un recuit est ensuite effectué pour augmenter la densité de l'oxyde.

Le dépôt de silicium poly-cristallin est réalisé à 620°C sous vide. Une fois les plaques mises en température, du silane, SiH<sub>4</sub>, gazeux est introduit dans la chambre. Le silane se dégrade en suivant la réaction :



Une régulation en pression est alors réalisée pour contrôler l'injection de gaz et ainsi le dépôt de silicium poly-cristallin. Le débit de silane est de 0,4 slm et la pression dans l'enceinte est maintenue à 200 mTorr (1 mTorr = 0,133 Pa). L'opération dure environ onze minutes pour un dépôt de polysilicium de 120 nm d'épaisseur. Néanmoins le procédé global dure cinq heures, en incluant les mises en température des plaques, la mise sous vide et le recuit.

### 1.1.2 Dépôt de TEOS (TétraEthOxySilane) au niveau des contacts électriques

Concernant le niveau des contacts, l'empilement réel de production, appelé PMD sur la Figure 1-1b, comprend plusieurs couches. En effet, le substrat en silicium

crystallin est recouvert d'une fine couche de siliciure de cobalt améliorant le contact électrique entre le métal et la zone à connecter, de deux couches de nitrure de silicium pour une première isolation et une couche épaisse d'oxyde de silicium pour une seconde isolation électrique. Dans le cadre de l'étude de faisabilité, cet empilement est simplifié pour ne conserver que la couche d'oxyde de silicium.

Contrairement à l'oxyde de grille présenté à la partie 1.1.1 qui croit par oxydation, la couche qui nous intéresse est déposée. La technique employée est un dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma, généralement appelé PECVD pour Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition [3]. La Figure 1-4 propose un schéma de principe d'une chambre permettant la génération d'un plasma.

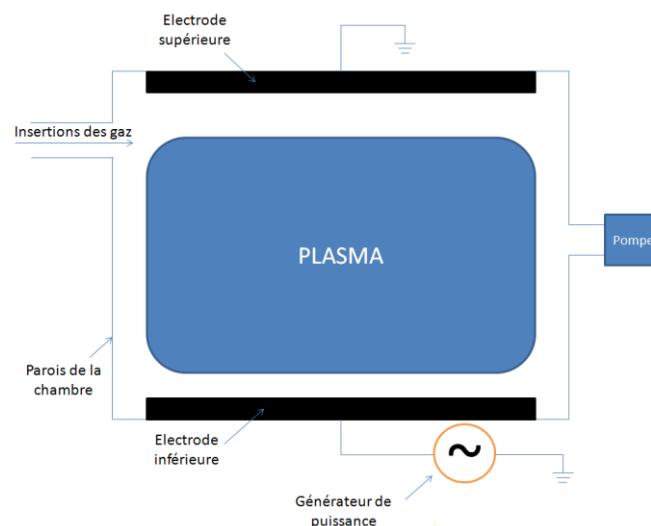
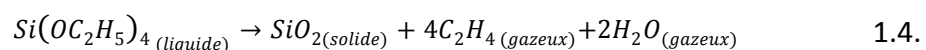


Figure 1-4 : Schéma d'un équipement permettant la génération d'un plasma.

Le dépôt d'oxyde est réalisé par l'introduction de TétraEthOxySilane, plus communément appelé TEOS. La réaction qui se produit à la surface de l'échantillon conduit au dépôt d'oxyde de silicium [4].



Le TEOS est acheminé sous forme liquide dans l'enceinte par un mélange d'hélium et de dioxygène gazeux. Les produits de réaction sont éliminés par

pompage hors de l'enceinte. Le dépôt s'effectue à une température de 400°C et la pression vaut 5 Torr.

A noter que par extension la couche d'oxyde de silicium déposée par cette technique est généralement appelé TEOS, ce qui est évidemment faux d'un point de vue chimique.

## 1.2 Photolithographie [5]

A la suite du dépôt des couches de matériaux, les plaques vont maintenant subir différentes étapes qui permettront la création de motifs. L'objectif est ici est de protéger certaines zones des attaques physico-chimiques de l'étape de gravure par des dépôts de résines. La technique employée sur le site de Rousset est basée sur le dépôt d'une couche de résine photosensible qui sera illuminée au travers d'un masque en quartz où les motifs ont été déposés en chrome. Deux équipements sont nécessaires :

- un « track », qui va permettre le dépôt des différentes couches de composés organiques et le développement de la résine;
- un « scanner » qui permet l'exposition du masque sur la résine.

### 1.2.1 Dépôts des couches d'antireflet et de résine

Au sein du track, la plaque subit successivement différentes étapes de fabrication, alternant refroidissement, dépôt de matériaux et chauffage. Ces étapes vont permettre à partir d'une température uniforme sur la plaque, généralement 21°C, de déposer une couche de matériaux organiques par enduction centrifuge (communément appelé spin coating). Deux dépôts sont réalisés successivement. La première est une couche d'antireflet ou BARC (pour Bottom Anti-Reflective Coating). La principale propriété de ce matériau est de posséder un faible coefficient de

réflexion. Ainsi, aucune réflexion parasite provenant des couches inférieures n'illuminera la résine, ce qui dégraderait fortement la création de motifs.



Figure 1-5 : Dépôt de BARC par spin coating.

La seconde couche déposée par la même technique est une couche de résine photosensible. Il existe deux possibilités :

- une résine dite « positive » dont la partie exposée sera supprimée lors du développement ;
- une résine dite « négative » dont la partie exposée sera conservée lors du développement.

Les résines utilisées à STMicroelectronics sont toutes positives. Leur nature peut également varier : leurs épaisseurs, indices et viscosités respectives sont des paramètres qui seront à prendre en compte pour la création de différents motifs et pour la réalisation de certaines dimensions critiques. De même la nature de la résine utilisée impactent les conditions d'illumination.

### 1.2.2 Exposition et développement

Le scanner, dont un schéma de principe est présenté par la Figure 1-6, utilise un laser à exciplexe, Argon-Fluor, dont la longueur d'onde est de 193 nm. L'intérêt

de ce type de source est de pouvoir définir théoriquement des motifs de 65 nm avec une très bonne cohérence optique. L'idée générale est de projeter l'image d'un réticule, où sont dessinés les motifs, sur la résine afin de la faire réagir. Pour obtenir une bonne impression de la structure sur la résine, plusieurs paramètres sont à prendre en compte comme la résolution R et la profondeur de champ DOF (Depth Of Field) :

$$R = \frac{k_1 \lambda}{N_A} \quad 1.5.$$

$$DOF = \frac{k_2 \lambda}{N_A^2} \quad 1.6.$$

avec :

- $\lambda$  la longueur d'onde de la source lumineuse ;
- $k_1$  et  $k_2$  des constantes qui dépendent de la cohérence de la source, des propriétés de la résine (transparence, épaisseur, ...) et du procédé de fabrication ;
- $N_A$  l'ouverture de la lentille utilisée pour la projection.

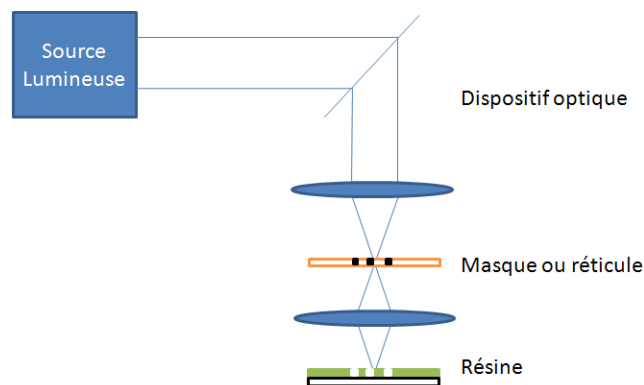


Figure 1-6 : Schéma de principe d'un scanner.

Le masque utilisé correspond au motif de l'étape de fabrication à exposer sur la plaque. Néanmoins sa taille ne correspond pas à la taille d'une plaquette. Le scanner réduit la taille du motif d'un facteur quatre. De plus, un masque correspondant à une zone délimitée (généralement quatre champs), le scanner est

associé à un dispositif mécanique déplaçant la plaque ou le scanner pour illuminer l'intégralité de la plaque et ainsi maximiser le nombre de champs et donc de puces.

Sur un wafer, les champs exposés rassemblent le produit, mais également des structures d'alignement, de mesures et de tests électriques. Tout ce qui ne constitue pas un produit se trouve dans les lignes de découpe.

Puis, la plaque retourne dans le track pour y être développée, suivant le même principe qu'en photographie argentique. Ainsi on va retirer par spin coating la résine exposée grâce à un solvant sélectif. Un nettoyage est ensuite réalisé, constitué d'un rinçage d'eau pure.

### 1.2.3 Application

Du dépôt à la réalisation des motifs sur la plaque, une succession d'étapes est nécessaire. Un détail des procédés de fabrication utilisés pour la réalisation de grilles de transistor est présenté par le Tableau 1-1.

L'empilement final obtenu est présenté sur la Figure 1-7. On y découvre les différentes épaisseurs de matériaux et l'empilement qui sera, par la suite, gravé par gravure plasma. A noter que pour les contacts, la résine utilisée est légèrement différente, il s'agit d'une résine appelée TARF 7052 de 395 nm d'épaisseur.

Etapes	Objectifs
Cool Plate	Uniformisation de la température à la température ambiante
Spin Coating	Dépôt d'antireflet
Hot Plate	Evaporation des solvants et fixation de la couche par chauffage puis refroidissement

<b>Spin Coating</b>	Dépôt de résine
<b>Hot Plate</b>	Evaporation des solvants et fixation de la couche par chauffage puis refroidissement
<b>Détourage</b>	Suppression du surplus de matériaux autour de la plaque
<b>Exposition</b>	Alignement de la plaque, insolation de la résine puis refroidissement
<b>Spin Coating</b>	Développement
<b>Post Develop Bake</b>	Evaporation des solvants et fixation de la couche puis refroidissement
<b>Cool Plate</b>	Refroidissement à la température ambiante

Tableau 1-1 : Procédés de fabrication du niveau "grille" en photolithographie.

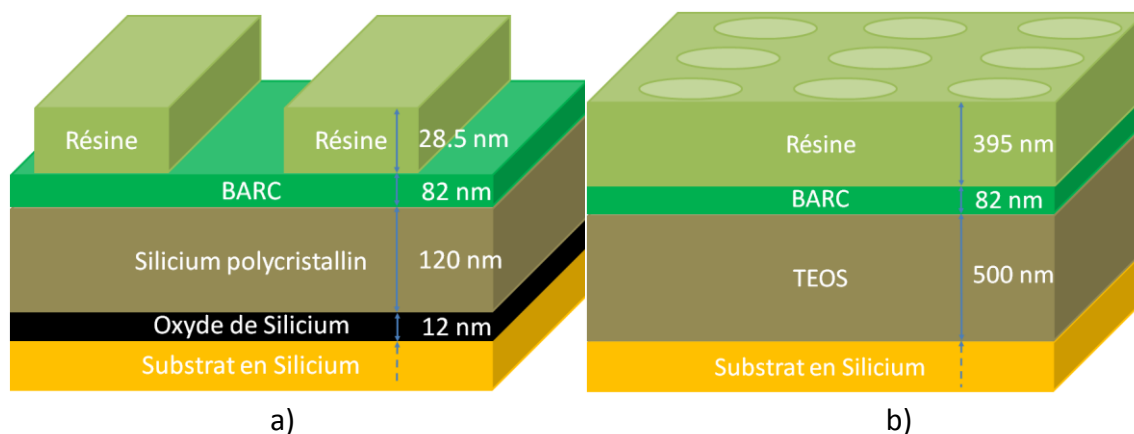


Figure 1-7 : Empilement après l'étape de photolithographie, a) « grille », b) « contact ».

### 1.3 Gravure sèche ou gravure plasma

Le but de la gravure est d'enlever la matière non protégée par la résine déposée lors de l'étape de photolithographie. La technique employée sur les lignes

de fabrication est dite gravure sèche ou gravure plasma. En effet, les propriétés physiques et chimiques du plasma, correspondant à un état ionisé de la matière, vont permettre une gravure maîtrisée des différentes couches souhaitées. A noter que ces équipements possèdent également une chambre dédiée au retrait de la couche de résine résiduelle après gravure.

### 1.3.1 Principe

Un équipement classique pour la gravure plasma se présente sous la forme d'une enceinte fermée, appelée « chambre », dans laquelle différents gaz sont introduits à une pression maintenue très basse. Grâce à un générateur de puissance, un champ électrique alternatif est créé dans l'enceinte permettant une accélération des électrons primaires présents (par ionisation naturelle). Le libre parcours moyen de ces électrons est suffisant pour ioniser par collision les autres espèces présentes, créant ainsi des électrons secondaires et des ions. Par effet de cascade, le plasma est amorcé. A noter qu'en microélectronique, les plasmas sont limités spatialement et entretenus artificiellement. Le schéma de principe, identique à celui présenté pour la technique PECVD est donc fourni par la Figure 1-4. Mais dans ce cas, les espèces chimiques mises en jeu vont permettre la gravure et non le dépôt.

Une fois le plasma généré, différents mécanismes entrent en jeu permettant la gravure de la couche souhaitée :

- réactions chimiques : adsorption, désorption, diffusion, production de produits dérivés ;
- réactions physiques : abrasion par bombardement ionique.

Les réactions chimiques ont la particularité d'être très sélectives. C'est-à-dire que la gravure dépend fortement des espèces chimiques mises en jeu et que le choix des réactifs est réalisé en fonction de l'espèce à graver. En contrepartie, ce type de gravure est isotrope. A l'inverse, le bombardement ionique est unidirectionnel et peu sélectif.



### 1.3.2 Concurrence des réactions et polymérisation

Les deux types de réactions, physiques et chimiques, sont donc en concurrence dans la chambre. Pour la réalisation de structures telles que la grille d'un transistor, on souhaite obtenir la sélectivité des réactions chimiques tout en étant anisotrope.

Dès le début de la gravure, des polymères sont créés par réaction chimique des espèces réactives sur la surface de l'échantillon ou par le bombardement ionique. La formation de ces éléments va dépendre principalement du masque de résine, du matériau gravé et de la couche inférieure, ne devant pas être gravée et dénommée par la suite couche d'arrêt. Ces éléments non volatiles se redéposent sur l'ensemble de la plaque et sur les parois internes de la chambre. Au niveau de l'échantillon, ce dépôt se comporte comme une couche de passivation, réduisant les attaques chimiques. La Figure 1-8 schématise les différentes étapes de ce phénomène. Dans un premier temps, les polymères formés vont se déposer pour former une couche de passivation envers les attaques chimiques sélectives. La gravure s'effectue ensuite en deux temps, un bombardement ionique unidirectionnel permettant la suppression de la couche de passivation dans les ouvertures, puis une gravure chimique sur la zone découverte. Ceci permet la création du motif voulu, sans détérioration de ses bords.

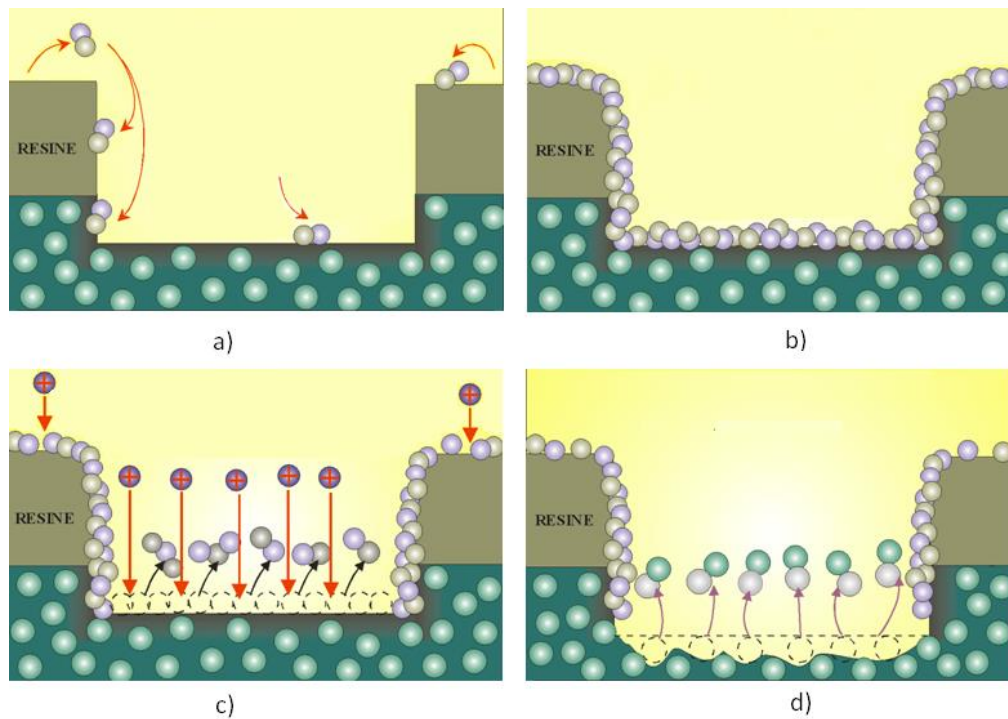


Figure 1-8 : Passivation par polymérisation, a) re-déposition des polymères, b) passivation, c) bombardement ionique anisotrope, d) gravure chimique sélective.

### 1.3.3 Espèces réactives

Le choix des réactifs est primordial car il permet de déterminer la vitesse de gravure et la sélectivité aux différents matériaux. Le Tableau 1-2 fourni la liste des gaz adaptés aux couches à graver. Ces gaz sont pour la plupart des composés halogénés. Ces éléments de grande électronégativité sont très oxydants vis-à-vis des métaux et forment différents composés avec les éléments simples comme le silicium et le carbone. A noter que l'hexafluorure de soufre,  $SF_6$ , et le tétrafluorure de carbone,  $CF_4$ , sont des réactifs très peu sélectifs, permettant la gravure du silicium, des nitrures, des oxydes et du tungstène.

Matériaux à graver	Réactifs possibles	Produits de réaction
Silicium	CF <sub>4</sub> , SF <sub>6</sub> , HBr, Cl <sub>2</sub> , NF <sub>3</sub>	SiF <sub>4</sub> , SiCl <sub>4</sub> , SiF <sub>2</sub> , SiBr <sub>4</sub>
Nitride, Oxyde	ChF <sub>3</sub> , C <sub>4</sub> F <sub>8</sub> , CF <sub>4</sub> , SF <sub>6</sub>	SiF <sub>4</sub> , CO, CO <sub>2</sub>
Tungstène	SF <sub>6</sub> , CF <sub>4</sub>	WF <sub>6</sub>
Aluminium	BCl <sub>3</sub> , HCl, Cl <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> Cl <sub>6</sub> , AlCl <sub>3</sub>
Arséniure de Gallium	Cl <sub>2</sub> , BCl <sub>3</sub>	Ga <sub>2</sub> Cl <sub>6</sub> , AsCl <sub>3</sub>
Polymères	O <sub>2</sub>	CO, CO <sub>2</sub>

Tableau 1-2 : Correspondance entre matériaux à graver et réactifs possibles.

De ce fait, selon l'empilement considéré, plusieurs étapes pourront être nécessaires avec différents mélanges de gaz pour optimiser la gravure de la couche présente et pour contrôler la polymérisation.

### 1.3.4 Détection de fin de gravure

Afin de détecter la disparition complète de la couche de matériau, plusieurs solutions existent. De façon empirique, le contrôle peut être réalisé par maîtrise temporelle et une gravure en temps fixe peut être employée. Pour un contrôle plus précis, un ellipsomètre spectroscopique peut également mesurer l'épaisseur des matériaux présents [6] ou un spectromètre peut mesurer la composition des gaz dans la chambre [7]. En observant la diminution en concentration des gaz réactifs ou en analysant la croissance des produits de réaction, il est possible de déterminer la fin de la gravure. Ce type de contrôle, appelé « end-point » est généralement utilisé en production. Une mesure interférométrique peut également être employée pour déterminer la fin de la gravure. Cette technique permet de mesurer le déphasage subi par une onde réfléchie à l'interface entre la couche à graver et le substrat.

### 1.3.5 Applications

#### 1.3.5.1 Gravure de grille

L'empilement, après l'étape de photolithographie, est présenté sur la Figure 1-7a). Pour ce type de gravure, il est important d'avoir une très bonne sélectivité des réactifs pour éviter la gravure de la fine couche d'oxyde de grille présente sous le silicium poly-cristallin. Plusieurs étapes vont donc être nécessaires. Le Tableau 1-3 les résume en indiquant les conditions expérimentales liées aux équipements utilisés. La gravure de grille est constituée de huit étapes, dont deux de stabilisation (Stab.), trois de gravure et trois de sur-gravure (Over-Etch, OE). Les étapes de stabilisation vont permettre l'introduction de gaz sans génération de plasma et de vider la chambre des résidus de gravure. Les étapes de sur-gravure sont mises en œuvre pour enlever tous les résidus de gravure. Ce sont généralement des étapes très sélectives, afin de préserver le matériau en surface. La couche de silicium poly-cristallin (POLY) est réalisée en deux temps, une première gravure avec la présence de CF<sub>4</sub> permettant une gravure rapide d'une grande épaisseur de matériau, puis une seconde étape plus sélective pour préserver la couche d'oxyde de grille. A noter l'introduction lors du début de la gravure du silicium poly-cristallin de dioxygène pour réduire la couche de polymérisation.

Etape	1	BARC	OE	POLY	POLY	OE	7	OE
Pression (mTorr)	15	7	7	5	30	30	80	80
Cl <sub>2</sub>	0	0	0	+	0	0	0	0
HBr	0	0	0	+	++	++	++	++
He/O <sub>2</sub>	0	0	0	0	+	+	+	+
CF <sub>4</sub>	++	++	++	+	0	0	0	0
He	0	0	0	0	0	0	+	+
Type	Stab.	EndPnt	Tps	Tps	EndPnt	Tps	Stab.	Tps
Temps (s)	30	40	45	28	36	10	15	60

Tableau 1-3 : Etapes de gravure de la grille (0, débit de gaz nul, + : débit de gaz non nul, ++ : débit de gaz plus important).

### 1.3.5.2 Gravure des contacts

Comme expliqué lors de l'étape de photolithographie, l'empilement utilisé pour les premiers tests sur les mesures de trous de contacts est simplifié par rapport à l'empilement réel. La chimie présentée par le Tableau 1-4 se rapporte à la gravure de cet empilement simplifié, présenté en Figure 1-7b). Du fait du nombre important d'étapes (17), seules les étapes de gravure du TEOS et du retrait de la résine sont présentées.

Etape	TEOS (8)	TEOS (11)	RESINE (14)
Ar	+++	++	+
O <sub>2</sub>	+	+	+++
CH <sub>2</sub> F <sub>2</sub>	+	+	+
C <sub>4</sub> F <sub>6</sub>	+	+	0
N <sub>2</sub>	0	0	+
Type	Tps	Tps	Tps
Temps (s)	45	75	75

Tableau 1-4 : Extrait des paramètres de gravure des contacts électriques : gravure TEOS (8 et 11) et retrait résine (14) (0, débit de gaz nul, + : débit de gaz non nul, ++ : débit de gaz plus important, +++ : débit de gaz supérieur à ++, tendance à titre indicatif).

La gravure de la couche de TEOS (d'épaisseur environ 500 nm) est réalisée en deux étapes, les éléments réactifs vont varier en concentration mais ces étapes sont réalisées en temps fixe.

L'ensemble des paramètres présenté ci-dessus correspond à un exemple de procédé utilisé en production. Néanmoins les échantillons étudiés diffèrent, car ils n'ont pas subi toutes les étapes de fabrication. Après inspection par microscopie électronique, on constate une sur-gravure de l'oxyde avec présence de perforation. Ce phénomène est illustré par la Figure 1-9.

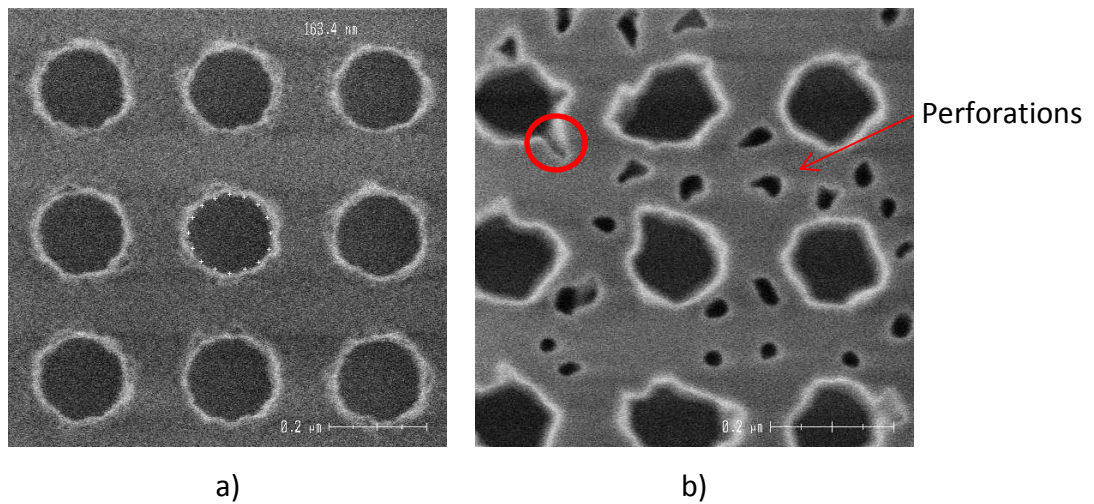


Figure 1-9 : Images CDSEM, a) après photolithographie, b) après gravure.

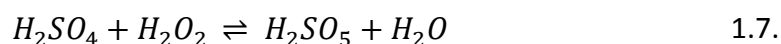
La principale cause de ce phénomène est un temps de gravure trop long. Pour pallier ce défaut, il est nécessaire d'anticiper l'arrêt de la gravure. Après étude des données spectroscopiques obtenues durant le procédé de fabrication, il est apparu que la résine et le BARC avaient été entièrement consommés, entraînant la gravure des zones qui auraient dû être protégées. La seconde étape de gravure TEOS a donc été modifiée en conséquence, avec une réduction du temps de procédé de 15 secondes, et l'arrêt fixé en « end-point ». Pour réduire les risques de dégradation, l'étape de retrait de résine a également été réduite de 35 secondes. Les compositions chimiques en gaz restent inchangées.

## 1.4 Gravure humide

La gravure humide correspond à une action uniquement chimique. Cette technique est principalement utilisée pour retirer complètement un matériau. Les équipements sont constitués de bains où sont mis en solution des réactifs chimiques, spécifiquement choisis selon le matériau. C'est une gravure très sélective et isotrope. L'utilisation principale de ce type de gravure en production est la réalisation de nettoyage et de traitement de surface. Typiquement, les opérations de

retrait de résidus de résine, d'antireflet et des couches sacrificielles (couches de protection lors de la définition de certains motifs) sont réalisées par gravure humide. A noter qu'un rinçage abondant par de l'eau dé-ionisée suivi d'un séchage sont des étapes nécessaires pour conclure un cycle complet de gravure humide.

Par exemple, le retrait de la résine et des polymères organiques est réalisé par un acide de Caro ou acide peroxymonosulfurique [8]. Cet acide est obtenu par la réaction suivante et est produit directement sur le site :



Ce composé est un oxydant puissant qui va décomposer les matériaux organiques en composés solubles et en dioxyde de carbone.

## 1.5 Gestion de la fabrication d'un échantillon spécifique

Dans le cadre de ma thèse, j'ai eu besoin de demander la réalisation de structures spécifiques afin de tester de nouveaux protocoles de mesures, qui seront présentés dans les chapitres suivants.

D'après ce que nous venons de présenter, la conception d'un échantillon va nécessiter différentes étapes de fabrication. Même après plusieurs années de doctorat, il n'est pas possible de devenir expert de chacune des étapes de fabrication de manière à pouvoir le fabriquer soi-même. De plus, tous les accès aux équipements sont réglementés et on privilégie la production. Dans ces conditions, il est nécessaire de travailler avec toutes les équipes en place. Pour cela, une bonne connaissance de toutes les étapes est importante, mais tout autant qu'une bonne écoute des recommandations des ingénieurs.

Pour réaliser les échantillons présentés par la suite, nous avons dû travailler en étroite collaboration avec trois équipes :

- équipe CVD (Chemical Vapor Deposition) : demande d'un dépôt existant en production avec un matériau et une épaisseur donnée ;
- équipe photolithographie : à partir d'un jeu de masques existant, la demande de l'exposition d'un motif est réalisée avec une dimension critique ;
- équipe gravure : la gravure ne peut être réalisée qu'à partir des données précédentes (matériaux, épaisseurs, motifs exposés) et il peut être nécessaire d'effectuer quelques essais selon les modifications réalisées par rapport à la production.

## **Conclusion**

La fabrication de composants de dimensions nanométriques est complexe et nécessite une multitude d'étapes. Différents pans de la physique sont utilisés pour concevoir des structures géométriques maîtrisées. Les différents échantillons étudiés ont été réalisés grâce à la collaboration de nombreux spécialistes.

De plus, il existe de nombreux contrôles non destructifs réalisés en production pour vérifier la reproductibilité et la fiabilité des procédés de fabrication.



## **Chapitre 2 : Outils de Métrologie**



## Introduction

Dans le contexte industriel, la majeure partie des procédés de fabrication est vérifiée et validée à chaque étape pour prévenir des dérives impactant le produit final. Associée à une production de masse, la conséquence d'une défaillance non détectée peut être économiquement catastrophique. Le contrôle de la production est organisé autour du suivi des lots, chacun contenant 25 wafers. Ce chapitre présente les outils de métrologie utilisés au cours de la fabrication d'un composant permettant les mesures de dimensions critiques et d'épaisseurs. Après avoir brièvement donné la terminologie utilisée pour les analyses statistiques des mesures, les différentes techniques d'inspection rencontrées en microélectronique seront présentées. Cette liste n'est pas exhaustive mais elle rassemble les techniques les plus courantes. Elles sont scindées en deux grands groupes, avec d'une part les techniques d'imagerie et d'autre part les techniques indirectes utilisant un algorithme d'inversion.

### 2.1 Dispersion et répétabilité

La métrologie des procédés de fabrication associe des outils de mesures à des analyses statistiques permettant d'effectuer un contrôle strict de procédé [9]. Différents paramètres sont employés en métrologie pour évaluer la cohérence et la qualité d'une mesure. Le critère primordial pour estimer la vraisemblance du résultat et de la valeur obtenue sera la détermination de différentes sources d'erreur possibles. On peut noter par exemple l'erreur inhérente à l'équipement de mesure, ou celle liée aux algorithmes d'analyse. En effet, si la mesure n'est pas stable et maîtrisée, il sera impossible de décorrélérer les différentes sources de variations possibles. L'objectif de la métrologie est de pouvoir estimer et qualifier la variabilité des procédés de fabrication. Il est important d'obtenir une mesure :

- juste ;

- répétable ;
- reproductible ;
- sensible.

La répétabilité reflète la capacité de l'équipement à fournir la même valeur lorsque la même structure est mesurée plusieurs fois. Quant à la reproductibilité, elle prendra en compte la variabilité de l'équipement, pouvant être induit par exemple par des variations de la température. Pour tester ces deux paramètres, une série de tests standardisés est effectuée tous les jours pendant trois jours. Chaque test correspond à dix mesures réalisées sur trois wafers. Les tests sont réalisés sur les mêmes wafers et aux mêmes sites de mesures, exactement aux mêmes coordonnées.

La dispersion est le paramètre clé dans toutes les mesures car on cherche à quantifier la variabilité, primordiale pour une maîtrise du contrôle des procédés. En microélectronique, la dispersion est évaluée avec le coefficient  $3\text{-}\sigma$ , correspondant à trois fois l'écart-type.

## **2.2 Mesures à base d'instruments imageurs**

Les outils de métrologie présentés dans ce paragraphe sont tous basés sur une technique permettant d'accéder à une image de l'échantillon à analyser. Les images sont ensuite traitées de manière à extraire des informations quantitatives sur l'échantillon.

### **2.2.1 Microscopie optique**

Il existe une multitude de méthodes de mesure basées sur l'imagerie. La plus commune d'entre elles est la microscopie optique. Cette technique permet un contrôle visuel rapide effectué par un opérateur pour la détection de défauts de taille micrométrique voir millimétrique. Les types de défauts repérés par une

inspection visuelle sont principalement des particules ou des résidus de taille micrométriques et des rayures. La limitation de la résolution des images, liée à la limite de diffraction intrinsèque aux instruments optiques, ne permet pas à ces microscopes d'explorer les échelles nanométriques, et donc les structures fines des composants. Les microscopes optiques présentent par contre l'avantage de pouvoir être utilisés comme outil de visualisation pour d'autres techniques en permettant de s'aligner automatiquement sur les zones à inspecter lorsque des analyses complémentaires sont nécessaires.

### 2.2.2 Microscopie électronique à balayage

#### 2.2.2.1 Présentation et principe

Les techniques d'imagerie par microscopie électronique sont majoritairement employées pour le contrôle en ligne des étapes de fabrication dédiées à la création de motifs géométriques. Que ce soit après le développement de la résine en photolithographie ou après la gravure, les dimensions des structures sont mesurées systématiquement en microscopie électronique [10].

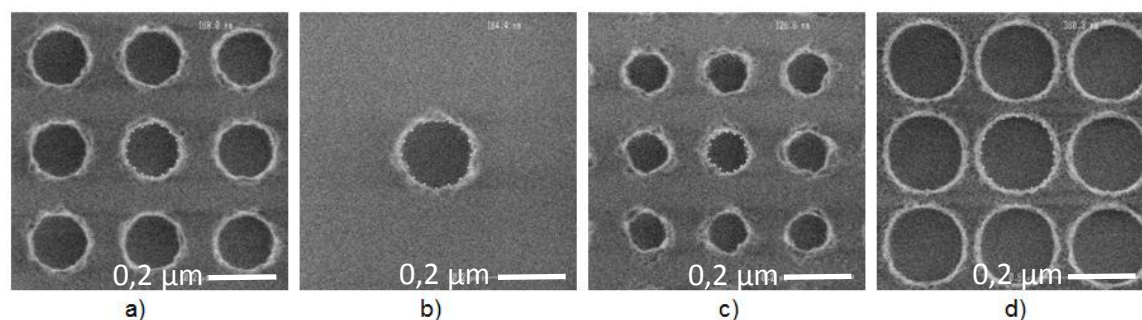
Le principe se base sur le balayage d'une surface avec un flux électronique primaire focalisé. A l'interface entre le vide et la surface, le sondage électronique interagit avec les atomes du matériau. Le choc entre un atome et un électron primaire peut avoir comme conséquence la libération par l'atome d'un électron proche de la bande de conduction qui sera appelé électron secondaire et donc une ionisation partielle de cet atome. En récoltant ces électrons secondaires de faible énergie via un détecteur adapté, une imagerie avec une résolution inférieure au nanomètre est possible. Il existe d'autres techniques d'analyse basées sur l'étude d'autres phénomènes pouvant survenir lors du sondage électronique. Les principaux, avec l'émission d'un électron secondaire sont l'émission d'électrons rétrodiffusés (lorsque l'électron primaire interagit avec le noyau), l'émission de photons (lors d'une désexcitation spontanée d'un atome) et d'un échauffement thermique de la surface étudiée. Des détecteurs adaptés sont nécessaires pour chacune de ces

techniques. Dans notre cas, les microscopes électroniques étudiés utilisent la génération d'électrons secondaires pour l'imagerie.

Le type d'équipement réalisant ces mesures est appelé CD-SEM pour Critical Dimension-Scanning Electronic Microscopy. Cette dénomination provient de la fonction principale de ces microscopes électroniques à balayage qui réalisent exclusivement des mesures dimensionnelles en vue du dessus. Les images sont analysées automatiquement via des algorithmes de détection de contour. L'objectif est de déterminer la dimension caractéristique de la structure. Cette dimension est nommée « dimension critique », notée CD par la suite, et dépend de la forme géométrique considérée. Par exemple, un transistor en vue du dessus sera représenté par un rectangle de silicium poly-cristallin. La dimension critique dans ce cas sera la largeur du rectangle.

#### 2.2.2.2 Exemple d'application

L'exemple suivant, illustré par la Figure 2-1, présente des mesures par microscopie électronique réalisées sur différents contacts électriques, de forme cylindrique. En vue de dessus, ils sont donc circulaires. La dimension critique dans ce cas est leur diamètre. Les informations présentes sur chacune des figures regroupent l'image résultant de la mesure traitée par l'algorithme de détection. On trouve une échelle et les points « + » déterminés par la détection de contour et servant au calcul du diamètre moyen du contact électrique central dont la valeur se trouve en haut à gauche.



**Figure 2-1 : Exemples de mesures de contacts électriques pour différents CD après photolithographie ; a) CD = 168 nm, b) CD = 184,4 nm, c) CD = 126,6 nm, d) CD = 368,3 nm.**

Pour vérifier l'uniformité des procédés sur l'ensemble du wafer, neuf mesures sont réalisées par wafer avec une moyenne de trois wafers par lot. Bien que la mesure soit considérée comme non destructive, il est possible que le flux électronique interagisse avec certaines résines [11]. Dans ce cas spécifique de structures en résine photosensible dédiée au scanner 193 nm, la conséquence est un élargissement des structures formées.

### 2.2.2.3 Avantages et inconvénients

La fabrication d'un composant inclut une multitude de mesures par microscopie électronique à balayage. La gamme des dimensions recherchées par ce type d'équipement est de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres à quelques micromètres avec une répétabilité inférieure au nanomètre et un temps de mesure de l'ordre de quelques secondes. Empiriquement, l'étape la plus longue dans le processus de mesure est la mise sous vide de l'enceinte où est positionné le wafer, nécessaire au flux électronique.

Les inconvénients de cette technique sont de ne fournir qu'une seule vue du dessus et d'être très localisée. Ceci limite les possibilités d'inspection et ne donne qu'une vue en deux dimensions de la forme des structures. Par exemple, les lignes de silicium poly-cristallin sont légèrement trapézoïdales, or en vue du dessus on ne voit que les arêtes du trapèze. L'information sur les pentes est impossible à obtenir.

## 2.2.3 Microscopie à force atomique

### 2.2.3.1 Présentation et principe

Une autre technique de mesure utilisée en production est la microscopie à force atomique [12]. On approche une pointe de la surface à analyser. Des interactions entre les atomes de la pointe et ceux de la surface vont apparaître (attractives, avec les forces de Van Der Waals, puis répulsives, avec les forces Coulombiennes lorsque la pointe touche la surface). Le levier maintenant la pointe

est éclairé par un laser. Lorsque la pointe balaie la surface, les interactions mécaniques repoussent ou attirent la pointe, la réflexion du faisceau laser va se déplacer, et son déplacement est mesuré sur une photodiode à quatre cadrans. En imposant à la pointe, par une boucle de rétroaction, une distance avec la surface constante, un système piezo-électrique vertical va repositionner la pointe automatiquement. C'est le suivi de ce déplacement mécanique qui permet de reconstruire la topographie de la surface.

Le déplacement latéral de la pointe sur la surface est assuré par un autre système piézo-électrique. Selon les équipements, il permet de balayer des zones de quelques nanomètres à plusieurs centaines de micromètres avec une résolution verticale inférieure au nanomètre. Cet instrument de mesure est dédié au contrôle de la topographie, comme les mesures de rugosité ou de la hauteur.

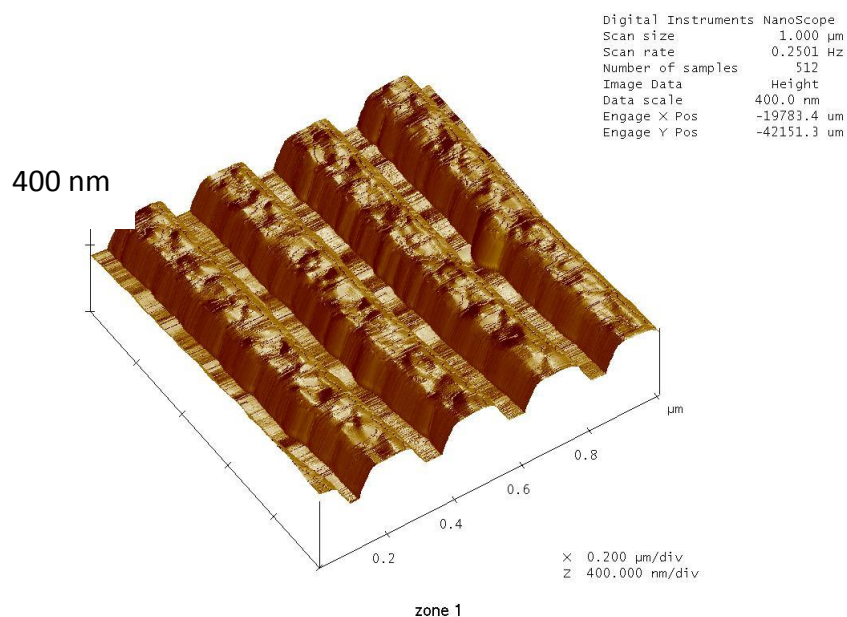
Comme la pointe balaye point par point la zone étudiée, le temps d'acquisition est souvent considéré comme long, principalement pour des applications industrielles. Ceci est d'autant plus vrai que la résolution souhaitée est grande.

Cependant pour certaines applications, comme la mesure de tranchée profonde, la microscopie à force atomique est toujours utilisée à l'heure actuelle en production. Sa grande résolution verticale ainsi que la possibilité d'avoir une mesure tridimensionnelle sont des avantages importants sur la microscopie électronique à balayage.

### 2.2.3.2 Exemple d'application

Les paramètres prépondérants pour l'analyse des mesures sont d'une part la taille de la fenêtre de mesure et d'autre part la résolution. Un exemple de mesure tridimensionnelle de lignes en silicium poly-cristallin est présenté sur la Figure 2-2.





**Figure 2-2 : Mesure de lignes de silicium poly-cristallin par AFM, sur une fenêtre de 1 x 1  $\mu\text{m}$  avec une résolution de 512 x 512 points.**

Le CD déduit de la mesure AFM en haut de la ligne vaut 91 nm, ce qui est proche de la valeur obtenue par CDSEM (94 nm). On obtient également une information supplémentaire sur la hauteur qui est de 121 nm. En production, les mesures actuelles sont exclusivement dédiées au contrôle de profondeur de tranchées et des hauteurs de lignes.

### 2.2.3.3 Avantages et inconvénients

Le principal avantage de cette technique est sa grande résolution verticale, de l'ordre du demi-nanomètre. Comme énoncé précédemment, la principale limitation est le temps d'acquisition. De plus, avec la réduction des dimensions, il devient difficile de mesurer des structures trop proches ou avec des dimensions ne permettant pas à la pointe de suivre parfaitement la topographie. La mesure de réseaux de contacts profonds, de l'ordre de 500 nm de profondeur avec un diamètre moyen de 120 nm est par exemple complexe. Les dimensions de la pointe ne permettent généralement pas d'inspecter le fond de ces structures. Un autre inconvénient majeur de cette technique est la fragilité des pointes.

Des améliorations existent, permettant par exemple de s'affranchir des dimensions de la pointe par déconvolution [13] ainsi que de nouveaux dispositifs

expérimentaux permettant des mesures de dimension plus petite grâce à une pointe en forme de marteau [14].

Néanmoins sur le site de STMicroelectronics, les mesures par microscopie à force atomique tendent à disparaître des lignes de production pour redevenir des outils de caractérisation complémentaires pour des analyses physiques.

### 2.2.4 Mesures par microscopie électronique après coupe

#### 2.2.4.1 Présentation et principe

Lorsque la situation le permet, il est parfois nécessaire d'utiliser des techniques d'inspection destructrices. Parmi ces techniques, une première étape par « Focused Ion Beam » (FIB) [15], permet de découper la structure à étudier grâce à un faisceau ionique (généralement du Gallium) focalisé. L'imagerie peut être réalisée par deux techniques, soit par sondage ionique (le principe est le même qu'en microscopie électronique mais le sondage est dans ce cas ionique), soit par microscopie électronique à balayage (SEM) ou à transmission (TEM) [16]. La résolution théorique de cet équipement, lorsque l'image est réalisée par une technique de microscopie électronique est largement inférieure au nanomètre.

#### 2.2.4.2 Exemple d'application

Ces techniques sont largement employées pour le contrôle dimensionnel. Les dimensions critiques et les épaisseurs peuvent être mesurées par analyse des images. En prenant par exemple le cas des contacts électriques, on peut voir sur la Figure 2-3 qu'une multitude d'informations est accessible : diamètre tout le long du contact électrique, épaisseur totale de TEOS et forme géométrique. On remarque d'ailleurs que les contacts électriques ont une légère forme en « amphore », avec un élargissement au centre du contact.

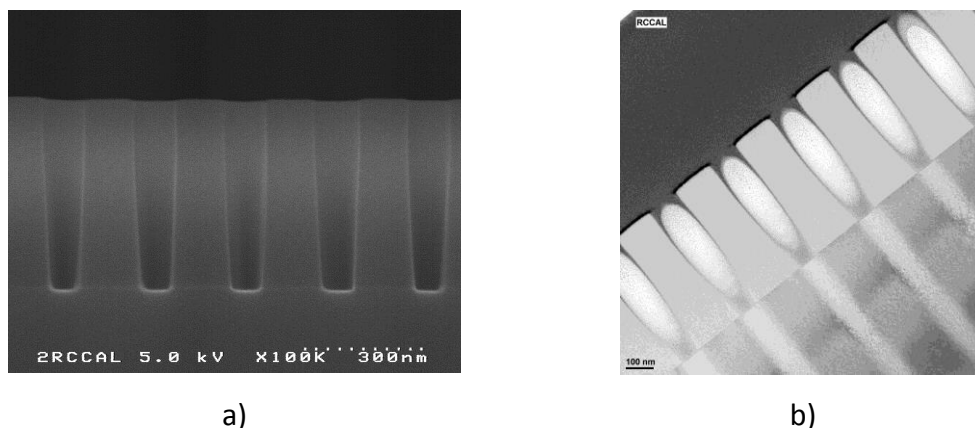


Figure 2-3 : Vue de contacts électriques réalisée par, a) SEM; b) TEM.

#### 2.2.4.3 Avantages et inconvénients

Ce type de technique n'est pas adapté au contrôle en ligne sur l'ensemble des produits car il s'agit de techniques destructives. En revanche, elles sont parfaitement adaptées à la vérification de dimensions sur des échantillons spécifiques ou pour un nouveau procédé de fabrication. La préparation des échantillons est également longue, notamment pour la microscopie électronique à transmission qui nécessite un amincissement de l'échantillon. L'incertitude de mesure est principalement liée au positionnement de curseurs permettant la détermination des dimensions sur les images obtenues. L'erreur est globalement estimée à 5%.

### 2.3 Techniques de reconstruction par inversion

Ces techniques sont basées sur la combinaison d'une mesure (en général sans contact et non destructrice) et d'un algorithme qui permet l'analyse quantitative de caractéristiques associées à l'échantillon. En général, la mesure consiste à envoyer une onde sur l'échantillon, à analyser et à détecter en champ lointain l'onde réfléchie ou transmise. Cette mesure est associée à un modèle (dit « direct ») qui permet de prédire la mesure à partir de la connaissance de l'onde incidente et de l'échantillon. La résolution d'un problème inverse permet de définir

les paramètres d'entrée du problème direct par convergence des résultats théoriques vers les résultats expérimentaux. Les techniques utilisées en production reposent sur des mesures optiques d'ellipsométrie.

### 2.3.1 Ellipsométrie spéculaire

L'ellipsométrie spéculaire est une technique bien connue permettant d'analyser et d'exploiter les différences d'état de polarisation subies par un faisceau lors de sa réflexion ou transmission par une interface [17]–[22].

On peut montrer que les paramètres ellipsométriques mesurés ( $\cos \Delta$  et  $\tan \Psi$ ) sont liés aux indices des matériaux, à leurs épaisseurs, à la formule des empilements. Les échantillons sont constitués de couches déposées sur un substrat dont l'épaisseur est considérée comme semi-infini. Cette technique est largement utilisée en microélectronique et plus largement dans le domaine des couches minces pour le contrôle de l'épaisseur ou la détermination d'indices optiques après dépôt [23], [24].

Il existe différents dispositifs expérimentaux permettant cette analyse. Néanmoins, le choix a été fait de se focaliser uniquement sur les techniques les plus communes, l'ellipsométrie à extinction, l'ellipsométrie spéculaire avec polariseur ou analyseur tournant et l'ellipsométrie spéculaire avec modulateur de polarisation [25]. La particularité de ces techniques est qu'elles sont modulables selon les besoins expérimentaux. Ainsi, ces techniques peuvent utiliser une source de lumière monochromatique ou polychromatique. Dans ce dernier cas, on parle d'ellipsométrie spectroscopique.

#### 2.3.1.1 Principe de l'ellipsométrie spéculaire

L'état de polarisation de la lumière correspond à la manière dont vibre le champ électrique dans le plan perpendiculaire à la direction de propagation. Dans ce plan, on choisit pour décrire le champ un repère dont les axes sont donnés par les directions parallèles (notée  $p$ ) et perpendiculaires (notée  $s$ ) au plan d'incidence.

Considérons la réflexion d'un champ incident  $\vec{E}_i$  sur une surface plane (Figure 2-4). Les champs incident  $\vec{E}_i$  et réfléchi  $\vec{E}_r$  se décomposent, dans le repère précédemment défini, respectivement en  $\vec{E}_{pi}$  et  $\vec{E}_{pr}$  parallèle au plan d'incidence et  $\vec{E}_{si}$  et  $\vec{E}_{sr}$  perpendiculaire au plan d'incidence.

Les champs électriques incident et réfléchi, sont reliés par les coefficients de réflexion complexes pour chaque direction de polarisation [26]:

$$\begin{cases} r_p = \frac{E_{pr}}{E_{pi}} = |r_p| \exp(j\delta_p) \\ r_s = \frac{E_{sr}}{E_{si}} = |r_s| \exp(j\delta_s) \end{cases} \quad 2.1.$$

avec  $|r_p|$  et  $|r_s|$ , les modules des coefficients de réflexion  $r_p$  et  $r_s$  ;  
 $\delta_p$  et  $\delta_s$ , les arguments ou phases des coefficients de réflexion  $r_p$  et  $r_s$ .

Expérimentalement, l'ellipsomètre permet la mesure des paramètres ellipsométriques  $\tan \Psi$  et  $\Delta$ , définis respectivement comme le module et l'argument du rapport des coefficients de réflexion  $r_p$  et  $r_s$  :

$$\frac{r_p}{r_s} = \tan \psi \exp(j\Delta) = \rho \quad 2.2.$$

avec :

$$\tan \psi = \frac{|r_p|}{|r_s|}$$

$$\Delta = \delta_p - \delta_s$$

On définit les indices optiques complexes des matériaux comme suit :

$$N_i = n_i - jk_i \quad 2.3.$$

avec  $n_i$  le coefficient de réfraction du matériau  $i$  ;  
 $k_i$  le coefficient d'extinction du matériau  $i$ .

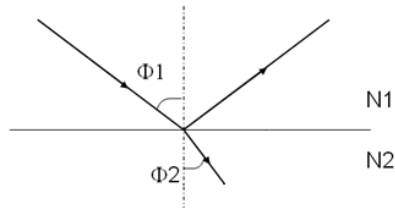


Figure 2-4 : Schéma représentant la réflexion et la réfraction dans le plan d'incidence.

Dans l'hypothèse d'un matériau isotrope et massif et en s'appuyant sur la Figure 2-4, les coefficients de réflexion et de transmission sont déterminés comme suit [17] :

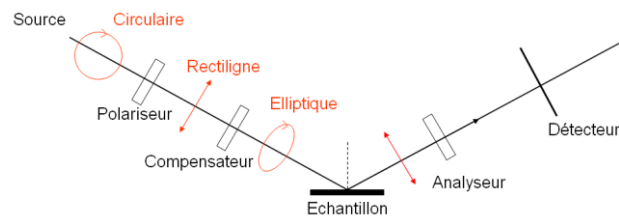
$$\left\{ \begin{array}{l} r_p = \frac{N_2 \cos \Phi_1 - N_1 \cos \Phi_2}{N_2 \cos \Phi_1 + N_1 \cos \Phi_2} \\ r_s = \frac{N_1 \cos \Phi_1 - N_2 \cos \Phi_2}{N_1 \cos \Phi_1 + N_2 \cos \Phi_2} \\ t_p = \frac{2N_1 \cos \Phi_1}{N_2 \cos \Phi_1 + N_1 \cos \Phi_2} \\ t_s = \frac{2N_1 \cos \Phi_1}{N_1 \cos \Phi_1 + N_2 \cos \Phi_2} \end{array} \right. \quad 2.4.$$

Dans le cas d'un matériau multicouche, une partie du faisceau se réfléchit à chaque interface et une autre est transmise à travers les différentes couches. La relation entre les différents indices est la loi de Descartes qui fournit le lien entre l'angle de réfraction  $\Phi_2$  et l'angle d'incident  $\Phi_1$  :

$$N_1 \sin \Phi_1 = N_2 \sin \Phi_2 \quad 2.5.$$

### 2.3.1.2 Ellipsomètre à extinction

Le premier montage étudié est l'ellipsométrie à extinction. La Figure 2-5 présente un schéma de principe de ce type d'appareil. Le polariseur permet d'obtenir une polarisation rectiligne à partir de la polarisation incidente. Le compensateur est réglé de manière à obtenir une lumière polarisée rectilignement après réflexion par l'échantillon qui pourra être éteinte par l'analyseur (placé en position croisée de la polarisation émergente). En pratique, on cherche un minimum d'intensité reçue sur le détecteur.



**Figure 2-5 : Ellipsomètre à extinction.**

Si on note  $A$ ,  $C$  et  $P$  respectivement les angles entre l'analyseur, le compensateur et le polariseur par rapport au repère  $(p,s)$ , on peut écrire le lien entre ces paramètres expérimentaux permettant l'extinction et les paramètres ellipsométriques [17] :

$$\tan \psi \exp(j\Delta) = -\tan A \frac{\tan C - \tan(P-C)}{1 + j \tan C \tan(P-C)} \quad 2.6.$$

La mesure est basée sur la recherche du minimum d'éclairement, ce qui entraîne des temps d'acquisition longs provoqués par l'optimisation de la position de chaque élément même lorsque le montage est entièrement automatisé et des mesures peu précises à cause du bruit intrinsèque à l'environnement de mesure.

### 2.3.1.3 Ellipsomètre à élément tournant

L'ellipsomètre à élément tournant est basé sur un montage similaire au précédent dans lequel on a retiré le compensateur (cf. Figure 2-6). Le polariseur ou

l'analyseur sont en rotation permettant de moduler le faisceau en polarisation. Pour la suite, on prend l'exemple d'un montage avec polariseur tournant, décrit par la Figure 2-6.

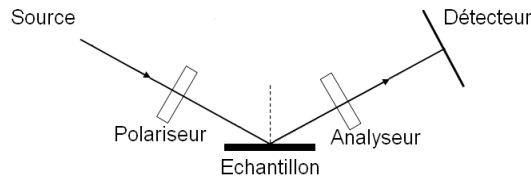


Figure 2-6 : Ellipsomètre avec un élément tournant.

L'intensité perçue par le détecteur s'écrit alors [26] :

$$I = I_0 (\alpha \cos(2P) + \beta \sin(2P) + 1) \quad 2.7.$$

avec 
$$\alpha = \frac{\tan^2 \psi - \tan^2 A}{\tan^2 \psi + \tan^2 A}$$

$$\beta = 2 \cos \Delta \frac{\tan \psi \times \tan A}{\tan^2 \psi + \tan^2 A}$$

$$I_0 = \frac{|r_s|^2 |E_0|^2}{2} \cos^2 A (\tan^2 \psi + \tan^2 A)$$

A partir de l'expression de l'équation (2.7), on en déduit que l'intensité détectée est modulée par l'angle du polariseur et que les coefficients  $\Delta$  et  $\tan \Psi$  peuvent être déterminés à partir de la connaissance de l'angle de l'analyseur A. L'avantage de cette technique est sa facilité de mise en œuvre.

#### 2.3.1.4 Ellipsomètre avec modulateur de phase

Pour cette technique, on ajoute un modulateur de polarisation. Ce nouvel élément va permettre d'introduire un déphasage connu et maîtrisé du faisceau incident, périodique de manière à permettre une analyse en harmoniques. L'analyse se fera à la fréquence du modulateur, réduisant considérablement le bruit de fond généré par la lumière parasite. Il existe différents moyens de moduler le faisceau incident, notre choix s'est porté sur un modulateur élasto-optique.



Le montage est similaire au montage d'ellipsométrie à élément tournant, mais la polarisation du faisceau incident varie dorénavant grâce à un modulateur de polarisation. Dans le cas d'un système élasto-optique, un barreau de silicium est comprimé mécaniquement et de façon sinusoïdale ce qui induit une biréfringence dynamique du silicium. A noter la possible biréfringence résiduelle provoquée par le système de fixation du barreau. Le retard introduit par cet équipement s'écrit alors [25] :

$$\delta_M(t) = \Delta_0(G)\sin(\omega t) + \alpha_M \quad 2.8.$$

avec  $\Delta_0$  : l'amplitude de la modulation, fonction du gain G  
 $\alpha_m$  : la biréfringence résiduelle du modulateur  
 avec la pulsation de modulation,  $\omega$ , de l'ordre de 50 kHz.

La Figure 2-7 présente le schéma du montage développé à l'Institut Fresnel et basé sur ce principe de fonctionnement. Ce montage est adapté sur un diffusomètre entièrement développé au laboratoire [25] et dont le schéma de principe est donné à la Figure 4-2. L'ellipsomètre profite ainsi de toutes les caractéristiques de cet outil et de tous ces degrés de liberté. Dans notre cas, la source est monochromatique, mais l'Institut dispose de plusieurs sources de longueurs d'onde allant de l'infrarouge au visible.

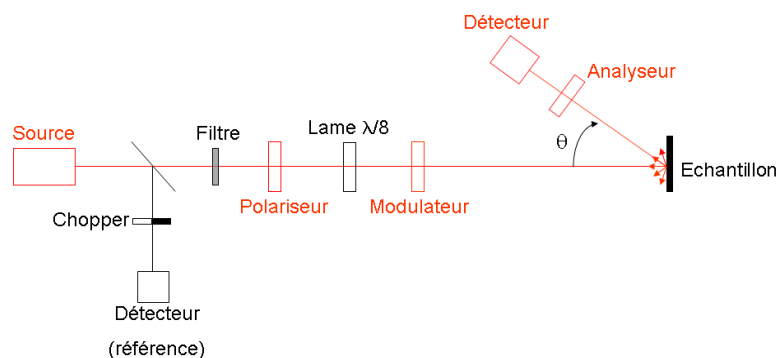


Figure 2-7 : Schéma de principe du banc d'ellipsométrie présent à l'Institut Fresnel.

Ce dispositif expérimental permet également de faire d'autres mesures comme de l'ellipsométrie sur flux diffusé. De plus, l'ajout d'une détection synchronisée sur la modulation du faisceau permet d'obtenir un rapport signal sur bruit optimal.

### 2.3.1.5 Exemple d'application

#### 2.3.1.5.1 Equipements disponibles

L'ellipsométrie est largement employée sur les lignes de production pour quantifier avec une grande répétabilité, de l'ordre de l'Ångström, les épaisseurs de multicouches déposées.

Dans le détail, le contrôle des différentes couches inhérentes aux procédés de photolithographie, comme les couches d'antireflets et de résines ainsi que les couches déposées par les procédés de dépôts, est réalisé par ellipsométrie soit sur wafer de test, soit sur les wafers de production dans des zones dédiées (structures de tests). Ces contrôles permettent de prévenir une dérive des épaisseurs de matériaux déposés et de rectifier les paramètres de dépôts. Si l'on prend l'exemple des fours de croissance, six lots sont traités en même temps. En ajoutant des wafers vierges lors du procédé, on peut mesurer uniquement la couche déposée sur ces wafers de tests réduisant ainsi la complexité de l'analyse de la mesure au minimum.

Une large gamme d'applications est possible grâce aux différents ellipsomètres embarqués dans un seul équipement. Ainsi une mesure via les OptiProbe™ de KLA-TENCOR™ peut être constituée d'un ensemble de techniques présentées dans le Tableau 2-1.

Technique de mesure (temps par point)	Longueur d'onde (Å)	Source de lumière	Taille du faisceau (µm)	Angle d'incidence (degrés)	Application
Beam Profile Reflectometry BPR (<1s)	~6730	Diode Laser	0.9	0-64	Épaisseur >200 Å Oxyde/Si Nitrure/Si Composés d'oxyde et de nitrure/Si Résine photosensible/Si Dielectrique/Métal
Beam profile Ellipsometry BPE: (<1s)	~6730	Diode Laser	0.9	0-64	100Å> Épaisseur >200Å Oxyde/Si Nitrure/Si Épaisseur < 100 Å Oxyde/Si Nitrure/Si
Spectromètre pour le Visible (~ 2-4 s)	5500-7800	Lampe halogène au tungstène	12	0-25	Métaux rugueux TiN/Al Combiné avec le BPR: Poly/Ox/Si OPO/Si NPO/Si
Ellipsomètre absolu AE (3-5 s)	6328	Laser He-Ne	~ 40	65	Épaisseur < 500 Å Oxyde/Si Nitrure/Si
Spectromètre large spectre (10-120 s)	1900-8000	Lampe au deutérium + Lampe halogène au tungstène	15	12-25	Combiné avec le BPR et le spectromètre « visible »: Oxyde/Nitrure/Oxyde fin Oxyde/Silicium Poly-cristallin/Oxyde/Si n et k dans l'UV
Ellipsomètre spectroscopique SE (10-15 s)	1900-8000	Lampe au deutérium + Lampe halogène au tungstène	~40-60	65	Combiné avec le BPR et le spectromètre « visible »: Oxyde/Nitrure/Oxyde fin Oxyde/Silicium Poly-cristallin/Oxyde/Si n et k dans l'UV Couche métallique Modèle de dispersion

Tableau 2-1 : Liste des équipements ellipsométriques disponibles et leurs applications.

### 2.3.1.6 Résolution du problème inverse

En amont des mesures, ce type de techniques nécessite l'élaboration d'un calcul permettant à partir des paramètres optiques et géométriques des surfaces étudiées de calculer les paramètres ellipsométriques. Il est donc primordial de connaître a priori les indices optiques et une estimation des épaisseurs des

matériaux. Une fois les résultats expérimentaux obtenus, un algorithme les compare avec les résultats du calcul direct et optimisera les paramètres d'entrée du modèle pour les faire converger. En général, les propriétés optiques des matériaux sont connues, l'optimisation se fera alors sur l'épaisseur.

La vraisemblance du modèle est définie par un critère de convergence qui permet de comparer les résultats calculés et expérimentaux. Ce paramètre, appelé « Goodness Of Fit » ou GOF, est défini tel que :

$$GOF = 1 - k \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (Mesure - Calcul)^2} \quad 2.9.$$

Avec k, un facteur de correction compensant une erreur de calcul sur le GOF induit par les variations de l'épaisseur. Il est important que ce critère de convergence soit le même dans le cas de mesures ellipsométriques et scattérométriques, définies dans le paragraphe suivant. Une mesure sera considérée comme satisfaisante pour un GOF compris entre 0,9 et 1. En production, l'expérience montre que selon les empilements, ce critère est à relativiser. En effet, pour des empilements simples, avec par exemple une seule couche fine (< 100 nm) d'oxyde de silicium, le GOF est de 0,99 alors que pour une mesure de structures périodiques rectangulaires, un GOF de 0,95 peut être acceptable. Dans tous les cas, il est primordial de confronter ces résultats analytiques à d'autres mesures pour valider la forme physique obtenue.

### 2.3.1.7 Avantages et inconvénients

A l'heure actuelle, les mesures par ellipsométrie sont incontournables. Elles sont, en effet, fortement utilisées en contrôle de procédés. Ces équipements possèdent une grande stabilité et les mesures sont généralement très répétables. L'incertitude de mesure est de l'ordre de l'Ångström. Mais elle prend en compte uniquement la mesure optique et non la résolution du problème inverse. L'expérience montre que l'incertitude globale de la technique est directement liée à la complexité de l'empilement étudié et à la robustesse du calcul d'inversion.

Typiquement, la superposition de couches alternativement identiques pose des problèmes de convergence du calcul. Par exemple, dans le cas de l'empilement Oxyde/Silicium poly-cristallin/Oxyde/Si étudié au chapitre suivant ou d'Oxyde/Nitride/Oxyde. La détermination de l'épaisseur sera réalisée en considérant une seule couche de propriétés optiques moyennées. Par contre, la mesure d'une couche d'oxyde de silicium de 50 Å sera fiable avec une dispersion totale inférieure à 1 Å.

Il est important de noter que cette technique ne permet pas de mesurer des couches de matériaux optiquement opaques, telles que des couches épaisses de métaux (d'épaisseur typiquement supérieures à quelques dizaines de nanomètres). D'autres techniques sont employées pour le contrôle des dépôts de ces couches.

### 2.3.2 Scatterometrie

#### 2.3.2.1 Présentation et principe

La scatterometrie est une méthode de mesure non destructive permettant, à partir de l'analyse de la réponse optique d'une surface diffractante, d'en déterminer les propriétés géométriques. Dans la majorité des cas, la mesure est effectuée grâce à un ellipsomètre associé à une méthode de résolution d'un problème inverse, qui permet à partir des mesures optiques de remonter aux grandeurs souhaitées. Pour cela, deux conditions doivent être vérifiées : il est nécessaire de connaître les indices optiques des matériaux et l'échantillon mesuré doit être constitué de réseaux périodiques.

La mesure est effectuée généralement par un ellipsomètre spectroscopique. Le choix d'une source polychromatique est motivé par le nombre d'informations supplémentaires obtenues (une par longueur d'onde). Ces mesures sont associées à la résolution d'un problème inverse dont le but est de déterminer les paramètres  $P$  permettant d'obtenir les mesures  $M$  d'un modèle diffractant  $f_D$ .

$$M = f_D(P) \quad 2.10.$$

Sachant que chaque mesure permet la détermination d'un couple de paramètres ellipsométriques ( $\Delta$  et  $\tan\Psi$ ) en fonction de la longueur d'onde. La taille  $N_M$  du vecteur  $M$  représentant les mesures est donc directement proportionnelle aux nombres de longueurs d'onde  $N_\lambda$  du spectre mesuré, on peut écrire que :

$$N_M = 2N_\lambda \quad 2.11.$$

La qualité de la résolution numérique correspond à l'écart entre les valeurs mesurées  $M_i$  et celles calculées  $\hat{M}_i$ . Afin d'obtenir une solution proche de l'expérience, il est nécessaire de quantifier cet écart et de le minimiser par itérations successives. Ce paramètre est appelé critère de convergence. Plusieurs fonctions dites de mérite sont disponibles :

- norme 1 :  $\chi^2 = \sum_{i=1}^N |M_i - \hat{M}_i|$
- norme 2 (Euclidienne) :  $\chi^2 = \sum_{i=1}^N (M_i - \hat{M}_i)^2$
- écart quadratique moyen :  $\chi^2 = \frac{1}{N_\lambda} \sum_{i=1}^N (M_i - \hat{M}_i)^2$

La norme euclidienne (ou norme 2) est considérée comme moins robuste, car elle peut introduire une erreur supplémentaire [27].

Pour le calcul de la solution expérimentale et la minimisation du critère de convergence, de nombreuses méthodes existent. Cependant, deux types de méthodes sont en concurrence actuellement. D'un côté, un calcul direct sera effectué par une méthode de résolution des équations de Maxwell sur une surface inconnue, en utilisant la méthode différentielle [28] par exemple. Un algorithme d'optimisation (par exemple, l'algorithme de Levenberg-Marquardt [29]) compare le résultat avec la mesure et modifie les paramètres géométriques et optiques de la surface jusqu'à la convergence des signatures ellipsométriques. L'intérêt de cette méthode est d'avoir une résolution en temps réel de la surface. Mais les calculs

d'optimisation peuvent entraîner une longue série de calculs directs, nécessitant des calculateurs puissants et onéreux.

La seconde approche palie cette contrainte. Elle consiste en la création en amont de la mesure d'une bibliothèque de signatures ellipsométriques. Cette base de données contient les résultats d'une simulation électromagnétique pour différentes variations de paramètres géométriques ou optiques. Lors de l'analyse des mesures, le calcul en temps réel vérifie la correspondance de la mesure expérimentale avec un des résultats stockés. S. Soulan [30] propose une méthode originale d'utilisation de GPU (Graphics Processing Unit) pour diminuer les temps de calcul pour la création de la bibliothèque. Dans cette configuration, le temps de calcul n'est plus un véritable problème par rapport aux contraintes industrielles puisque la base de données est générée au préalable. En contrepartie, cette technique n'offre plus une approche en temps réel.

Les équipements disponibles à STMicroelectronics (cf le Tableau 2-1) sont capables à partir des mesures d'ellipsométries spectroscopiques et d'un calcul de résolution de problème inverse de reconstruire des formes géométriques périodiques en temps réel.

Comme pour les autres techniques, les mesures sont effectuées dans des mires spécifiques. Elles sont constituées par un réseau de la structure étudiée, lignes ou contacts par exemple. Les exemples d'application seront présentés au chapitre suivant. Mais l'intérêt de cette technique par rapport à la microscopie est de pouvoir fournir différentes informations géométriques (épaisseur, CD) en réalisant une seule mesure. La littérature présente de nombreuses applications. L'expérimentation menée par Huang est particulièrement intéressante car les géométries sont particulièrement complexes [31], [32].

### 2.3.2.2 Avantages et inconvénients

Le principal avantage de cette technique est de bénéficier de mesures avec une incertitude faible, de l'ordre de l'Ångström. Par contre, l'inconvénient majeur de ce type de méthode est qu'une faible variation des données initiales provoque une

forte variation dans la solution. Pour tous les outils commerciaux disponibles à STMicroelectronics, cette forte dépendance vient de la faible largeur de spectre bornée du proche ultra-violet au proche infrarouge (de 250 nm à 800 nm) couplée à une mesure effectuée uniquement sur l'ordre 0 diffracté. Pour limiter ce phénomène, il est impératif de caractériser les matériaux utilisés (indices optiques et extinctions notamment) et la forme de la géométrie étudiée via d'autres techniques. Ainsi un modèle initial fiable et précis pourra être développé.

De plus, en optimisant au maximum les données d'entrée pour être physiquement proche de la réalité, la convergence sera d'autant plus rapide.

Il est important de noter que le très grand nombre de paramètres (grand nombre de couches, de matériaux...) peut également être un frein pour la mise en place d'un calcul répétable et robuste.

### **2.4 Autres techniques**

Il existe dans le domaine de la nanoélectronique plusieurs techniques de mesures. Comme nous avons pu le voir précédemment, la microscopie électronique à balayage, l'ellipsométrie et la scatterometrie permettent de contrôler la quasi-totalité des étapes de fabrication.

Cependant, il existe d'autres techniques primordiales pour le contrôle de fabrication. On pourra citer les mesures d'overlay réalisées après les étapes de photolithographie [33]. Ces mesures permettent un contrôle du désalignement entre deux niveaux successifs. L'inspection est réalisée par microscopie optique. A partir de l'imagerie d'une mire spécifique, un calcul du décalage en x et y est réalisé. Il existe différentes structures de tests, mais un exemple est fourni sur la Figure 2-8. Ces mesures sont réalisées sur un ou deux wafers par lot sur des machines spécifiques. La couche supérieure doit être optiquement transparente.



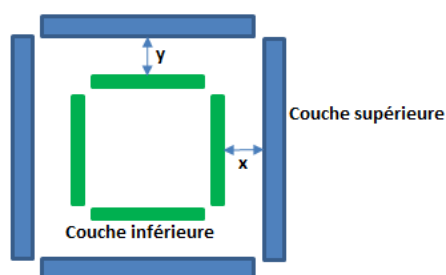


Figure 2-8 : Exemple de mires d'overlay.

L'ensemble des techniques présentées couvrent des mesures dimensionnelles. Mais il existe d'autres types d'inspections telles que les mesures de contaminants ou de défauts. Un grand nombre de tests électriques est également réalisé lors de la fin du procédé de fabrication afin de vérifier le bon fonctionnement du composant.

Un large panel de techniques existe également pour l'inspection physico-chimique. Ces techniques ne sont pas adaptées en production (temps long, destructives, ...), mais sont utilisées pour des analyses complémentaires. On trouve par exemple des techniques d'analyses chimiques comme le « Secondary Ion Mass Spectrometry » (SIMS) ou la spectroscopie Auger. Il existe une multitude d'autres techniques de métrologie qui ne seront pas développées ici.

## Conclusion

La fabrication de composants de nanotechnologie nécessite l'utilisation d'un large éventail de techniques d'inspection en constante évolution. C'est d'ailleurs, en partie, dû aux impératifs fixés par l'ITRS que de larges progrès ont été réalisés en métrologie sur le plan de la précision et de la répétabilité.

Chaque procédé de fabrication va nécessiter indépendamment des autres des outils de caractérisations spécifiques. Cependant, trois techniques sont majoritaires et jouent un rôle fondamental : l'ellipsométrie (désignant ici la technique de mesure associée à la détermination d'épaisseur ou de propriétés optiques de matériaux), la microscopie électronique à balayage et la scatterométrie

(désignant l'association d'une mesure d'ellipsométrie et la résolution d'un problème inverse pour l'obtention de caractéristiques géométriques de l'échantillon).

Concernant les mesures dimensionnelles, deux approches se dégagent. La microscopie électronique, à balayage ou à transmission, est une technique d'inspection très localisée. Les zones imagées font généralement moins de  $2 \mu\text{m}^2$  avec le grossissement utilisé en production. Les techniques d'ellipsométrie nécessitent intrinsèquement une zone de mesure plus grande, de l'ordre de  $50 \mu\text{m}$  (elles permettent d'analyser l'intégralité de la zone éclairée). En effet, le diamètre du faisceau varie selon les équipements utilisés entre  $0,9 \mu\text{m}$  et  $50 \mu\text{m}$  et la zone de mesure doit au moins être de la taille du faisceau pour éviter les effets de bords (diffraction, mauvais alignement).

**Chapitre 3 : Applications de l'ellipsométrie  
et de la scatterométrie pour la caractérisation  
de structures géométriques**



## Introduction

Ce chapitre présente les différentes applications industrielles en métrologie réalisées au cours de cette thèse grâce aux techniques présentées dans le chapitre précédent. L'objectif est d'étudier de nouvelles structures intégrées dans des composants de microélectronique, dont les caractéristiques géométriques rendent difficiles ou inadaptées les mesures classiques ou les traitements associés.

Des empilements originaux avec nanocristaux de silicium ou des mesures d'épaisseur d'oxyde natif seront ainsi étudiés par ellipsométrie.

Nous nous intéresserons également à des caractérisations de structures 1D ou 2D, avec une première reconstruction bidimensionnelle de la grille de silicium polycristallin et l'étude tridimensionnelle de contacts électriques par scatterométrie. En effet, l'introduction de la mesure de CD au niveau de la grille de polysilicium par scatterométrie avait permis un gain notable en dispersion et par conséquent, une optimisation des boucles de contrôle de procédés. Dans le but d'avoir un résultat équivalent sur les trous de contacts électriques, un groupe de travail a été initié au démarrage de cette thèse afin de mettre en relation le département R&D et l'équipe de métrologie en production. Ceci a permis d'appréhender au mieux les contraintes industrielles et de réaliser une étude de faisabilité en prenant en compte les recommandations de la production.

Dans ce chapitre, bien que les deux techniques soient basées sur des mesures d'ellipsométrie, le terme d'ellipsométrie est employé pour désigner les mesures d'épaisseurs, alors que la scatterométrie est la technique qui permet les reconstructions géométriques de réseaux périodiques. Cet abus de langage est courant en microélectronique.

### 3.1 Etude et caractérisation de nanocristaux de silicium

A partir de mesures acquises avec l'ensemble des techniques d'ellipsométrie présentées dans le Tableau 2-1, une étude a été réalisée pour la caractérisation d'une couche de nanocristaux intégrée dans les mémoires non-volatiles, nouveau procédé de fabrication [34] dont la faisabilité industrielle a été étudiée à STMicroelectronics Rousset par Julien Amouroux [35]. La principale contrainte pour la caractérisation de cette couche est liée à la structure intrinsèque des nanocristaux. En effet, la croissance des cristaux de silicium (suivant un procédé similaire au dépôt de silicium poly-cristallin avec un temps plus court de l'ordre de quelques secondes) rend la couche hétérogène. La Figure 3-1 présente deux vues différentes par microscopie électronique à balayage du même wafer.

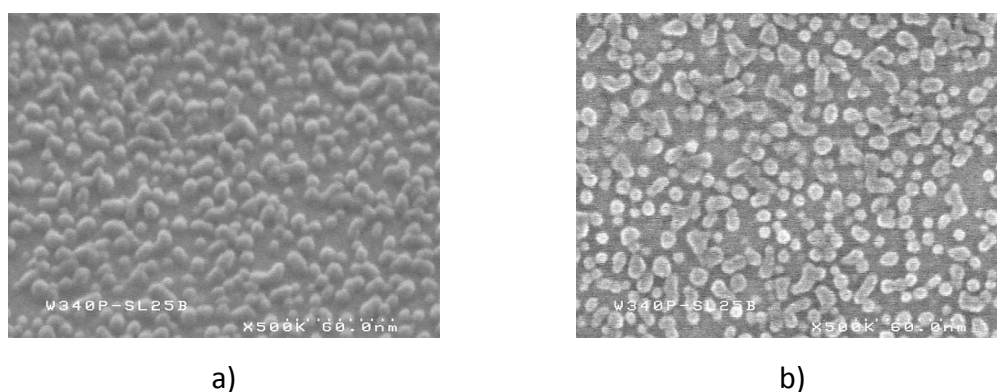


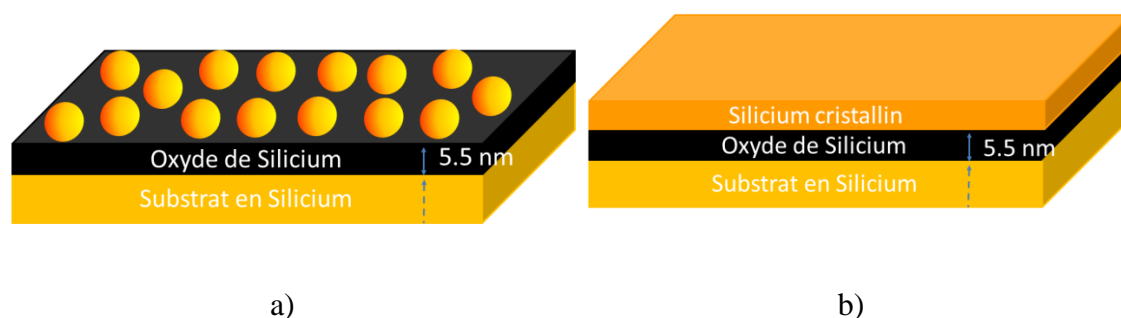
Figure 3-1: Image CDSEM d'une couche de nanocristaux, a) tiltée à 40 °, b) vue de dessus.

Une méthode de calcul par traitement d'images a été développée pour l'analyse des images de microscopie électronique. Elle permet l'extraction du diamètre moyen des nanocristaux et du taux de recouvrement correspondant au rapport entre la surface couverte par les nanocristaux par rapport à la surface totale. A partir de ces données fournies par CDSEM, un calcul approché est réalisé pour estimer une épaisseur de couche équivalente comparable à celle que fournirait l'ellipsométrie. Notre méthode d'analyse par ellipsométrie avec une couche de

silicium équivalente sera confrontée aux résultats obtenus par les analyses des images de microscopie électronique.

### 3.1.1 Nanocristaux seuls

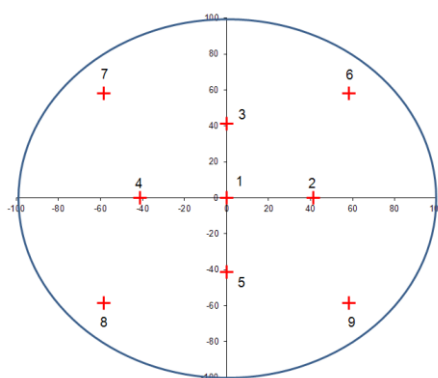
L'empilement étudié est représenté sur la Figure 3-2a. Une couche d'oxyde de 55 Å est formée à la surface du substrat. Ensuite, l'épaisseur de cette couche est légèrement réduite par une étape de nettoyage préalable à la croissance des nanocristaux de silicium.



**Figure 3-2 : Empilement étudié a) présentant des nanocristaux de silicium, b) Empilement équivalent pour l'ellipsométrie.**

Comme présenté dans le chapitre 2, l'ellipsométrie permet de déterminer l'épaisseur d'une couche uniforme. On assimile donc les nanocristaux à une couche équivalente uniforme en s'appuyant sur les travaux réalisés par Bertin et al [36]. Dans ces travaux, un modèle pour l'indice optique correspondant aux deux couches, oxyde de silicium et nanocristaux de silicium est proposé. A noter qu'une couche de nitrure est également prise en compte dans leur étude. L'indice optique équivalent est déterminé par le modèle EMA, pour « Effective Medium Approximation ».

Neuf mesures sont réalisées sur l'ensemble de la plaque selon la cartographie donnée par la Figure 3-3. A noter que ce type de cartographie sera employé de façon récurrente pour l'ensemble des mesures d'ellipsométrie<sup>1</sup>.



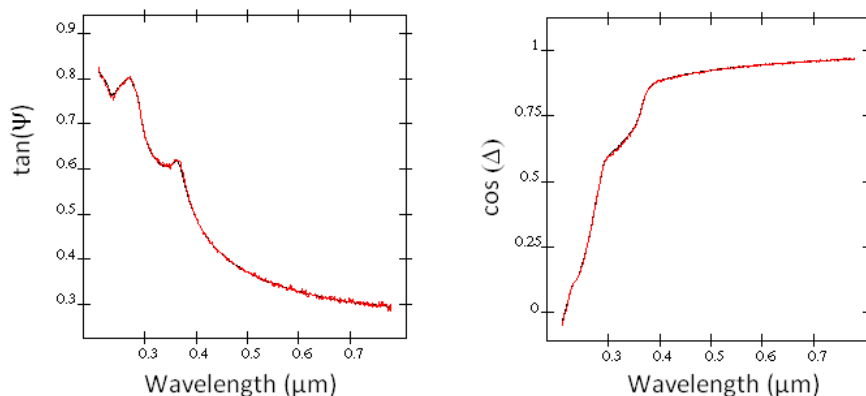
**Figure 3-3 : Cartographie des points de mesures sur un wafer 200 mm, employée pour les mesures d'ellipsométrie.**

Les paramètres ellipsométriques (cf Figure 3-4) sont déterminés à partir du traitement des mesures obtenues grâce à l'ellipsomètre. Le traitement est effectué via le logiciel GO BOX™ fourni par l'équipementier. Ce traitement consiste en un calcul par itérations. Initialement, l'indice optique et l'épaisseur des matériaux sont fixés, un calcul direct est réalisé pour déterminer les paramètres ellipsométriques liés à ce modèle initial, puis par itérations successives, en optimisant l'indice et l'épaisseur, on fait évoluer le modèle jusqu'à ce que la mesure et le résultat du calcul concordent. Une fois que les paramètres ellipsométriques calculés et expérimentaux coïncident, alors nous estimons que le modèle correspond à l'empilement mesuré.

---

<sup>1</sup> Chaque mesure en production est réalisée selon une cartographie bien précise. Un certain nombre de points au bord et au centre du wafer sont nécessaires pour valider l'uniformité du procédé de fabrication.





**Figure 3-4 : Paramètres ellipsométriques en fonction de la longueur d'onde, en noir la courbe calculée, en rouge la courbe mesurée, pour l'empilement complet.**

Afin d'obtenir cet empilement, trois étapes de fabrication sont nécessaires. Un dépôt d'oxyde de silicium est réalisé en four de dépôt. Cette couche subit alors une étape de nettoyage, permettant ensuite la croissance des nanocristaux en four également. Une mesure est réalisée après chacune des trois étapes de procédés. Le Tableau 3-1 regroupe les résultats de chacune de ces mesures selon les pointés de mesures décrits par la Figure 3-3.

	Epaisseur d'oxyde de silicium (Å)	Epaisseur d'oxyde de silicium après nettoyage (Å)	Epaisseur de la couche de silicium équivalente (Å)
<b>1</b>	55	52	31
<b>2</b>	54	52	31
<b>3</b>	54	52	32
<b>4</b>	55	52	31
<b>5</b>	55	52	32
<b>6</b>	55	52	36
<b>7</b>	55	52	35
<b>8</b>	57	52	36
<b>9</b>	55	52	36
<b>GOF moyen</b>	0,994	0,994	0,988

**Tableau 3-1 : Calcul d'épaisseur à partir des mesures ellipsométriques, dans le cas de nanocristaux sur oxyde de silicium.**

La différence d'épaisseur entre les deux premières colonnes indique que la couche d'oxyde de silicium est réduite de 3 Å en moyenne suite à l'étape de nettoyage par gravure humide. L'épaisseur de la couche équivalente correspondant aux nanocristaux est de 33 Å d'après les mesures d'ellipsométrie présentées ci-dessus. A titre de comparaison, il est possible, comme nous l'avons expliqué auparavant, de déduire le diamètre moyen des nanocristaux et le taux de recouvrement à partir du traitement des images obtenues par microscopie électronique [35]. Pour cet échantillon, trois mesures ont été réalisées, au centre, à mi-rayon et en bord de la plaque. Les résultats sont réunis dans le Tableau 3-2.

	Centre	Mi-rayon	Bord
<b>Diamètre moyen (Å)</b>	92,5	89,6	92,1
<b>Densité (NC/cm<sup>2</sup>)</b>	5,86E+11	6,12E+11	5,99E+11
<b>Taux de couverture (%)</b>	39,3	38,5	39,9
<b>Épaisseur équivalente (Å)</b>	36	35	37

**Tableau 3-2 : Données géométriques obtenues par mesures CDSEM (NC pour NanoCristaux).**

Le comportement entre le centre et le bord du wafer est quasi identique, fournissant une information sur la bonne uniformité du procédé de fabrication. Le calcul d'épaisseur équivalente et homogène en silicium cristallin, fourni par le Tableau 3-2, est déterminé en multipliant le diamètre moyen par le taux de couverture. En effet, d'après les images de microscopie électronique (comme celle présentée sur la Figure 3-1a), on peut faire l'hypothèse que les structures sont sphériques, ce qui nous permet d'utiliser la valeur du diamètre moyen calculé par le traitement de l'image obtenue par microscopie électronique.

L'épaisseur est de l'ordre de 36 Å en centre et bord de plaque et de 35 Å à mi-rayon. Une différence de 3 Å sur la mesure de couche d'oxyde de silicium mesurée en ellipsométrie est significative car maîtrisée. On estime l'incertitude de mesure pour une mesure d'oxyde de silicium de quelques nanomètres comme étant inférieure au nanomètre (de quelques Ångström). Cependant sur une mesure où aucun test de répétabilité n'a été effectué, comme c'est le cas pour la technique de

traitement des images obtenues par microscopie électronique, cette différence de 1 Å n'est pas significative.

Si une moyenne est établie sur la plaque, les deux techniques de mesures proposent des épaisseurs de silicium cristallin très proches. L'écart relatif moyen étant seulement de 3 Å. Ces résultats sont donc plutôt satisfaisants.

### 3.1.2 Nanocristaux recouverts de nitrure de silicium

Un dépôt de nitrure de silicium, SiN, a été envisagé pour isoler les nanocristaux électriquement. Le dépôt de cette couche a la particularité d'être très sélectif, c'est-à-dire qu'il ne se fait que sur les nanocristaux de silicium. Ici on ne peut plus considérer la couche équivalente comme une couche de silicium cristallin pur, mais comme un mélange de silicium cristallin et de nitrure de silicium. Pour cela, on utilise un modèle EMA (pour Effective Medium Approximation) [36]. La même étude que précédemment a été réalisée, en prenant en compte ce nouveau modèle de dispersion, qui correspond au comportement de l'indice du matériau en fonction de la longueur d'onde. Les proportions de chaque matériau seront déterminées par régression. Un récapitulatif des épaisseurs déterminées est fourni ci-dessous dans le Tableau 3-3.

	Épaisseur d'oxyde de silicium (Å)	Épaisseur d'oxyde de silicium après nettoyage (Å)	Épaisseur de la couche équivalente (Å)
1	55	52	60
2	56	52	61
3	56	52	61
4	55	52	61
5	56	52	61
6	56	52	63
7	56	51	63
8	56	52	63
9	56	52	63
<b>GOF moyen</b>	0,995	0,994	0,989

Tableau 3-3 : Calculs des épaisseurs des couches de nanocristaux recouverts de SiN sur oxyde de silicium par ellipsométrie.

On note bien une augmentation de l'épaisseur de la couche due à ce dépôt supplémentaire. Le modèle basé sur une couche homogène équivalente d'un mélange des deux matériaux permet d'obtenir un critère de convergence quasiment égal à 0,99. Les proportions de matériaux sont de l'ordre de 40% de silicium et de 60% de nitrure après convergence.

Des mesures CDSEM sont réalisées comme précédemment sur les mêmes échantillons, et les résultats sont réunis dans le Tableau 3-4.

	Centre	Mi-rayon	Bord
Diamètre moyen (Å)	127	126	119
Densité (NC/cm <sup>2</sup> )	3,75E+11	3,91E+11	4,56E+11
Taux de couverture (%)	43,9	48,4	46,5
Epaisseur équivalente (Å)	56	61	56

Tableau 3-4 : Données géométriques obtenues par mesures CDSEM pour l'échantillon Si/SiN (NC pour nanocristaux).

L'écart moyen entre les deux techniques de mesures est légèrement supérieur au cas précédent sans nitrure, de l'ordre de 4 Å. Cet écart s'explique par l'introduction de la couche de nitrure. Comme vu précédemment, l'hypothèse dans laquelle on a admis que la couche de nanocristaux pouvait se réduire à une couche uniforme est moins représentative de l'empilement réel puisque ces derniers sont entourés d'une couche de nitrure de silicium. L'utilisation d'un modèle EMA introduit également deux nouveaux paramètres dans la résolution du problème inverse qui sont les proportions de chaque matériau dans le mélange. Ces concentrations étant liées entre elles, on a donc une inconnue supplémentaire à optimiser.

### 3.1.3 Conclusion

Les résultats obtenus mettent en évidence la possibilité de mesurer par ellipsométrie ce type de couche atypique en considérant une couche uniforme d'épaisseur équivalente. La comparaison avec une autre technique de mesure, basée

sur un traitement d'images par microscopie électronique, donne de très bons résultats.

Ces essais uniquement exploratoires ont démontré la possibilité d'un contrôle du procédé avec les équipements disponibles en production avec une grande précision, de l'ordre de quelques Ångström, et une très bonne répétabilité. L'ellipsométrie semble être un moyen fiable pour ce procédé de fabrication en utilisant d'autres modèles de dispersion comme par exemple le modèle EMA (Effective Medium Approximation) permettant d'approximer des couches hétérogènes plus finement [37].

Une étude approfondie évaluant l'impact de la taille et de la densité des nanocristaux sur l'épaisseur de la couche équivalente devrait être réalisée par la suite. De même, une industrialisation ne pourrait se faire sans une étude de répétabilité avancée pour figer de manière industrielle les paramètres de mesures dans des conditions multiples. Ces études n'ont pas été réalisées car le développement industriel de mémoires à nanocristaux par STMicroelectronics a été momentanément suspendu.

### **3.2 Caractérisation de la couche d'oxyde natif sur silicium poly-cristallin**

Au contact de l'air, le silicium poly-cristallin s'oxyde lentement pour former une couche d'oxyde natif de 2 nm d'épaisseur environ. La connaissance de l'épaisseur de cette couche est cruciale pour la suite du procédé de fabrication, car le polysilicium sera inévitablement recouvert par cette couche d'oxyde. Afin de maîtriser l'épaisseur totale, il est primordial de connaître l'épaisseur de cette couche native. A l'heure actuelle, la plaque subit un nettoyage pour éliminer cet oxyde. Pour s'affranchir de cette étape, une étude de faisabilité de la mesure de cet oxyde a été réalisée.

L'empilement considéré, représenté sur la Figure 3-5, est un multicouche formé par une couche d'oxyde de silicium, une couche de silicium poly-cristallin et une fine couche d'oxyde de silicium natif.

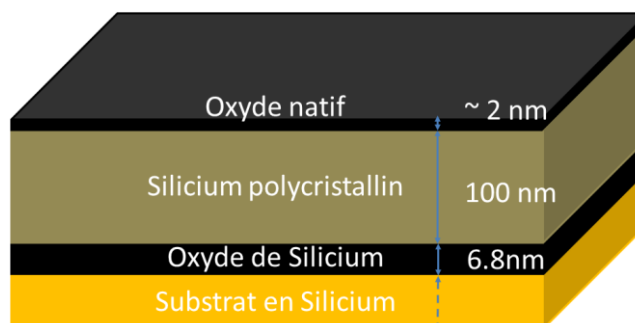


Figure 3-5 : Empilement avec oxyde de silicium natif sur niveau de grille.

L'ensemble des équipements est utilisé pour déterminer l'épaisseur de cette couche. A noter que la présence de deux couches d'oxyde autour de la couche de silicium poly-cristallin est un empilement récurrent en microélectronique mais qui soulève des problèmes dans la résolution du problème inverse. En effet, la présence de deux couches des mêmes matériaux diminue la qualité de la convergence, et dégrade la fiabilité du calcul de chacune des deux épaisseurs. Dans cette approche et pour une meilleure convergence, seule l'épaisseur superficielle sera calculée. La seconde couche d'oxyde, d'épaisseur 6,8 nm, est fixée dans le modèle. Ceci est possible car cette couche est mesurée avant le dépôt de silicium poly-cristallin par ellipsométrie.

Un wafer est mesuré par ellipsométrie suivant la cartographie fournie par la Figure 3-3. Les épaisseurs des différentes couches déduites de ces mesures sont réunies dans le Tableau 3-5. La valeur moyenne de l'épaisseur de l'oxyde natif est de 23 Å.

	Epaisseur d'oxyde natif (Å)	Epaisseur de silicium poly-cristallin (Å)	GOF
1	22	977	0,998
2	22	977	0,998
3	22	977	0,998
4	23	976	0,998
5	24	977	0,998
6	23	974	0,998
7	22	975	0,998
8	23	974	0,998
9	23	976	0,998

Tableau 3-5: Mesures par ellipsométrie d'épaisseurs d'oxyde natif sur silicium poly-cristallin.

Afin d'étudier la croissance de cet oxyde natif, deux séries de neuf points de mesures suivant la cartographie précédente sont réalisées sur un nouveau wafer à deux semaines d'intervalle. La Figure 3-6 montre que la croissance de l'oxyde natif est de 2 Å en deux semaines. L'épaisseur initiale de la couche formée initialement s'accroît de 27 Å à 29 Å.

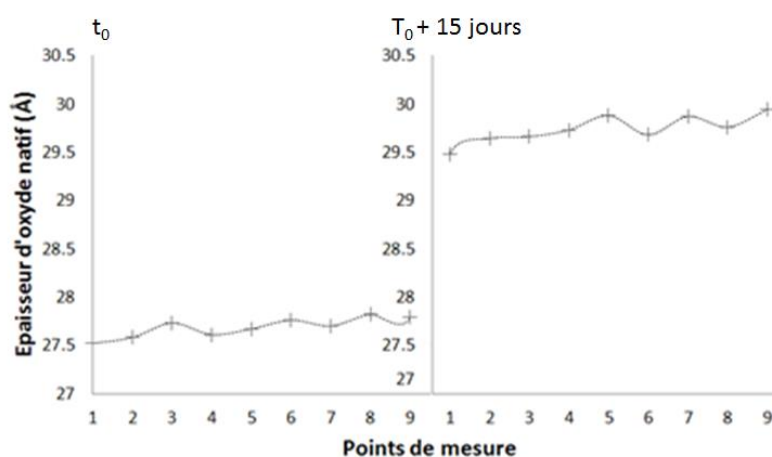


Figure 3-6 : Etude de vieillissement d'une couche de silicium poly-cristallin.

Une mesure relative de l'épaisseur d'oxyde natif a été obtenue et une variation dans le temps a été observée. Une couche d'une vingtaine d'Ångström d'oxyde de silicium est mesurée par ellipsométrie.

Ce résultat est cependant à nuancer, car la différence d'épaisseur de 2 Å constatée entre les mesures réalisées à 2 semaines d'intervalles pourrait aussi être induite par l'adsorption de contaminants comme des traces d'eau et d'hydrocarbures présents naturellement dans l'environnement, qui modifient les indices optiques de la couche de surface, et fausse par conséquent les interprétations des mesures. Ce phénomène connu perturbe l'analyse par ellipsométrie qui conclut à un accroissement artificiel de l'épaisseur. Ce phénomène est une des limitations de la reproductibilité de la mesure d'oxyde fin. Pour pallier cette contamination, il serait nécessaire avant chaque mesure de chauffer les wafers inspectés au moyen d'un désorbeur pour évaporer et évacuer les contaminants. Suite à cette étude, l'étape de nettoyage a donc été conservée.

### **3.3 Mesures de lignes de silicium poly-cristallin**

La fabrication des lignes de silicium poly-cristallin est une étape cruciale dans la réalisation des transistors et nécessitent donc la mise en place d'un contrôle strict des procédés. Avant l'introduction de la scatterométrie sur le site de Rousset, ces mesures étaient réalisées par microscopie électronique à balayage, en vue de dessus. Ces mesures par imagerie sont très localisées et ne permettent pas de rendre compte parfaitement des profils complets (comme la pente et l'épaisseur des matériaux). Le principal intérêt de la scatterométrie est la faible dispersion comparée aux techniques par microscopie électronique à balayage.

La structure étudiée est dans ce cas une zone déportée hors du produit. Elle est présentée sur la Figure 3-7 sous la forme de lignes en silicium poly-cristallin sur une fine couche d'oxyde de silicium.



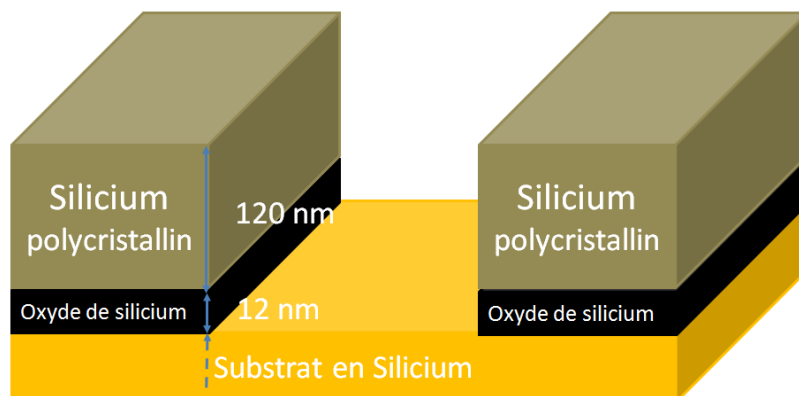


Figure 3-7 : Schéma de l'empilement de la structure de silicium poly-cristallin sur oxyde de silicium.

### 3.3.1 Mesures par microscopie électronique à balayage

La microscopie électronique à balayage permet d'avoir une mesure rapide, mais localisée, en vue de dessus. Cette technique est utilisée après l'étape de photolithographie et après l'étape de gravure. Ces deux mesures permettent le suivi et la régulation de ces deux procédés. Un exemple de ces deux mesures est présenté sur la Figure 3-8. La seule information obtenue est la largeur de la ligne qui est de 123 nm en photolithographie et de 92 nm après gravure.

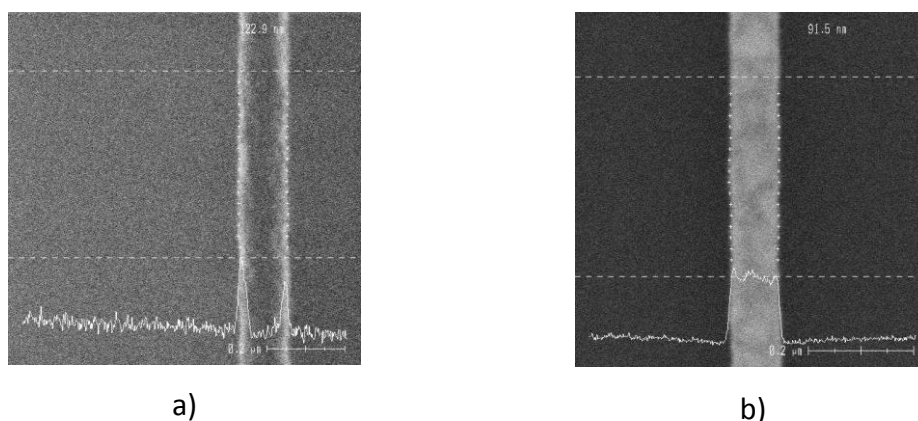


Figure 3-8 : Mesure de la grille a) en résine photosensible après photolithographie, b) en silicium poly-cristallin après gravure. Images CDSEM.

Il est à noter que ces images sont acquises spécifiquement dans une zone de mesure dédiée, appelé Mesdim13, pour MESure de DIMension n°13. La zone imagée est pointée par la flèche sur la Figure 3-9.

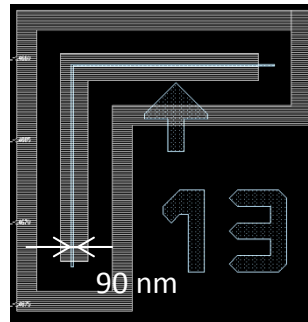
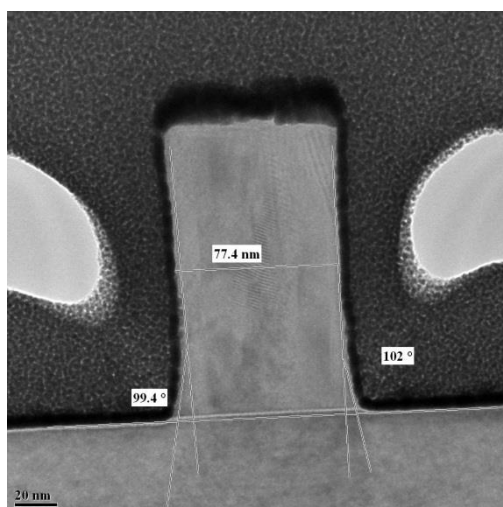


Figure 3-9 : Visualisation de la zone de mesure appelée MESDIM 13.

### 3.3.2 Mesures par microscopie électronique à transmission

Afin d'avoir plus de renseignements sur la forme géométrique globale de cette structure, une coupe et une imagerie par microscopie électronique à transmission sont réalisées. Un exemple est donné sur la Figure 3-8. En plus de la valeur de la largeur de la ligne, les informations supplémentaires accessibles sont l'épaisseur de silicium poly-cristallin et les pentes indiquées par des mesures d'angles de part et d'autre de la ligne en silicium poly-cristallin. Par contre, cette mesure est localisée à une seule ligne.

Le terme SWA est l'abréviation de « Side Wall Angle » et correspond à l'angle formé entre le substrat et le bord de la ligne en silicium poly-cristallin. Par exemple, la valeur de SWA est de 99° pour la partie gauche et de 102° à droite.



**Figure 3-10 : Coupe d'une ligne de silicium poly-cristallin vue par microscopie électronique à transmission.**

On observe sur l'image précédente deux formes ovales. Ce sont des zones non remplies par les couches de préparation nécessaires à la réalisation de mesure par microscopie électronique à transmission.

### 3.3.3 Mesures par scatterométrie

Cette technique est réalisée dans une zone spécifique constituée d'un réseau de lignes. Cette zone, appelée mire, est éclairée par un faisceau de diamètre 40  $\mu\text{m}$ . Le traitement des mesures permet alors d'accéder à une information sur la forme géométrique moyennée sur des centaines de structures (contrairement aux mesures de microscopies électroniques qui donnent accès à une mesure localisée). La mire considérée est un carré de 50  $\mu\text{m}$  de côté. Pour les mesures présentées, deux périodes de réseaux seront étudiées :

- une structure appelée « dense » avec une période théorique très resserrée de 150 nm ;
- une autre appelée « isolée » avec une période théorique de 500 nm.

Ce choix d'étude sur deux structures de périodes différentes est lié au comportement de l'étape de gravure. Empiriquement, il a été démontré que les

profils des structures considérées comme denses sont mieux définis que ceux des structures isolées.

La zone mesurée par microscopie électronique à balayage se rapproche plus, de par sa conception, d'une structure isolée, puisque la Mesdim n'est constituée que d'une seule ligne. Les effets possibles liés à la densité ne s'appliquent pas dans ce cas.

Les résultats obtenus sur un wafer avec 15 zones de mesures différentes sont résumés dans le Tableau 3-6 et sont comparés avec les techniques de microscopies électroniques.

Comme énoncé précédemment, la mesure CDSEM est plus proche de la structure isolée avec un écart de 2 nm entre le CD isolé obtenu par scatterométrie et celui obtenu par CDSEM. Des écarts plus importants sont relevés sur les angles, de l'ordre de 10% entre la scatterométrie et la coupe TEM. Cette différence peut s'expliquer en partie par l'incertitude sur la mesure TEM évaluée à 5%, l'angle étant mesuré manuellement par l'opérateur.

	Scatterométrie	TEM	CDSEM
CD - période 500 nm (nm)	94	85	-
SWA - période 500 nm (°)	90.9	100 – 105	-
CD - période 150 nm (nm)	79	77	-
SWA - période 150 nm (°)	89.7	99.4 – 102	-
CD – Mesdim (nm)	-	91	92
SWA - Mesdim (°)	-	87.4 – 92.2	-

**Tableau 3-6 : Résumé des mesures de CD et de pentes effectuées par différentes techniques de mesures.**

Afin d'évaluer la dispersion pour chacune de ces techniques, une analyse a été réalisée sur l'ensemble d'une plaque avec neuf zones de mesures différentes. Le paramètre  $3\sigma$  (correspondant à trois fois l'écart-type d'une population d'analyses

par plaque) pour les mesures CDSEM est de l'ordre de 4 nm après photolithographie et de 5 nm après gravure. Ce premier écart s'explique par l'incertitude de mesure, inférieure au nanomètre pour la microscopie électronique à balayage et n'est pas significatif. Il n'est que de 1,5 nm pour la mesure isolée après gravure en scatterométrie. Ce gain de 2,5 nm est crucial pour l'optimisation des boucles de régulation [9], [38]. En production, l'analyse par scatterométrie est utilisée dans les boucles de régulation pour les étapes de gravure.

### 3.3.4 Conclusion

D'un point de vue métrologique, la comparaison entre différentes techniques permet de montrer les avantages et les inconvénients de chacune. Ainsi, la mesure par microscopie électronique à balayage présente une mesure en vue du dessus avec une analyse d'image robuste et une incertitude faible, inférieure au nanomètre. Par contre, l'analyse par scatterométrie permet d'accéder à un plus grand nombre d'informations (CD, épaisseur, pente) avec une meilleure dispersion que celle offerte par microscopie électronique. Les analyses réalisées en microscopie électronique à transmission offre l'avantage de visualiser la forme réelle de la structure, la statistique sur la forme moyenne est très faible et les mesures réalisées manuellement ne sont pas précises (incertitude estimée à 5%). Le bénéfice de la mise en place de la scatterométrie en production est donc immédiat.

Aucun bénéfice notable en revanche sur le temps de mesure entre la microscopie électronique à balayage et la scatterométrie. Le temps d'analyse est du même ordre de grandeur et inférieur à 1 minute par wafer (ce temps ne prend pas en compte le chargement du lot sur l'équipement).

### 3.4 Mesures de trous de contacts

Les trous de contact, de forme cylindrique, sont à l'heure actuelle uniquement mesurés par CDSEM mais l'utilisation de la scatterometrie émerge depuis quelques années [39]–[41]. D'après ce que nous avons vu dans le chapitre 2, ces équipements de microscopie électronique à balayage sont limités en résolution et par une vue de dessus, la scatterometrie apparaît comme un moyen plus adéquat pour obtenir les dimensions fabriquées en trois dimensions. L'équipementier principal pour le site de Rousset de STMicroelectronics pour la scatterometrie, KLA-TENCOR, propose via son logiciel de traitement IRACE™, la reconstruction de trous de contacts grâce à la résolution du problème inverse en s'appuyant sur des mesures d'ellipsométrie spectroscopique [39], [42]. L'intérêt principal de cette méthode est la régression en « temps réel », qui permet d'avoir la forme du contact sans générer de longues bibliothèques de signatures ellipsométriques au préalable.

Le but de l'étude est donc de démontrer la possibilité de reconstruire cette géométrie par cette technique en comparant les résultats obtenus aux autres types de mesures disponibles en production, la microscopie électronique à balayage et à transmission.

Pour ces comparaisons, plusieurs structures se situant à différentes localisations sur une plaque de 200 mm de diamètre sont étudiées. Les résultats sont donc analysés pour chaque technique de mesure en différents points d'un même wafer.

#### 3.4.1 Etude de faisabilité sur échantillons en TEOS

Dans le cadre d'une étude de faisabilité, une première série d'échantillons est fabriquée. L'empilement étudié est simplifié par rapport à la version de production standard pour ne conserver qu'une seule couche de TEOS, d'environ 500 nm d'épaisseur, déposée sur un substrat en silicium cristallin.

Ces plaques subissent les étapes de photolithographie, de gravure et de nettoyage standard correspondant aux procédés de fabrication des trous de contacts. L'utilisation des étapes de fabrication existantes permet de bénéficier à la fois d'une grande rapidité d'exécution ainsi que de structures parfaitement maîtrisées.

#### 3.4.1.1 Mesures par microscopie électronique

Une mesure CDSEM, qui est à l'heure actuelle la seule mesure présente en production, est réalisée. Comme précédemment, cette mesure est effectuée sur une mire spécifique appelée MESDIM19 (MESure de DIMension n°19) qui est constituée ici d'un réseau de 121 contacts, qui est matérialisé par des carrés verts sur la Figure 3-11. Chaque technique de mesure nécessite une structure spécifique, pour pouvoir être comparable, elles sont toutes fabriquées en même temps, lors des mêmes procédés.

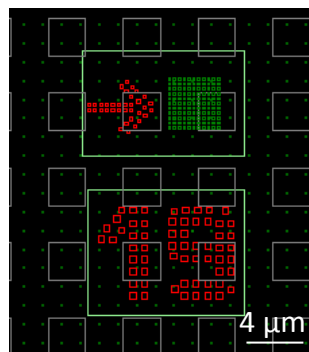


Figure 3-11 : Zoom sur la zone Mesdim19 mesurée par microscopie électronique à balayage.

A partir de cette mesure, correspondant à une photographie électronique en vue de dessus, on obtient peu d'informations. Un contrôle du diamètre d'un contact (ou moyenne de plusieurs selon les options choisies) est réalisé grâce à un algorithme de détection de contour par différence de contraste. Le Tableau 3-7 ci-dessous résume l'ensemble des valeurs mesurées par cette technique sur trois plaques.

### Chapitre 3 : Application de l'ellipsométrie et de la scatterométrie pour la caractérisation de structures géométriques

Chaque zone de mesure se situe dans un champ créé par photolithographie. Les coordonnées indiquées correspondent à une numérotation dans l'espace par rapport au champ central (0 ; 0).

	-2	-1	0	1	2
Wafers					
1	109 116 104	100 108 115	103 118 113		104 117 107
0		109 115 118			
-1				105 114 111	104 117 110
-2		106 113 117	104 117 111		

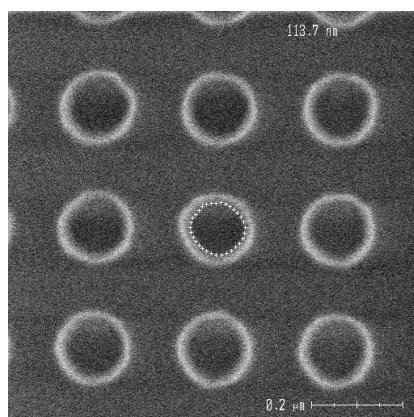
Tableau 3-7 : Relevés des CD mesurés par CDSEM sur 9 champs exposés pour trois wafers (nm).

Pour l'imagerie, la mise au point sur les mesures est réalisée au fond du contact, le diamètre relevé en production est donc le diamètre moyen du fond du contact.

En production, la dispersion entre les zones de mesures sur une même plaque est généralement grande, de l'ordre de 5 à 6 nm. Ceci se traduit par des limites de spécification (correspondant aux bornes de variation au sein desquelles le procédé de fabrication sera jugé acceptable) sur la mesure de  $\pm 7$  nm autour de la valeur ciblée. Si le CD dépasse la valeur attendue de plus ou moins 7 nm, alors la fabrication de ce wafer sera arrêtée pour une analyse complémentaire. Selon l'étape de fabrication, soit les dernières couches pourront être retirées et subir de nouveau l'étape de fabrication (uniquement les étapes de photolithographie), soit, et c'est le cas des étapes de gravure, le wafer sera détruit car ses propriétés électriques ne seront pas satisfaisantes. Cette mesure est donc critique.

Un exemple est donné dans la Figure 3-12.



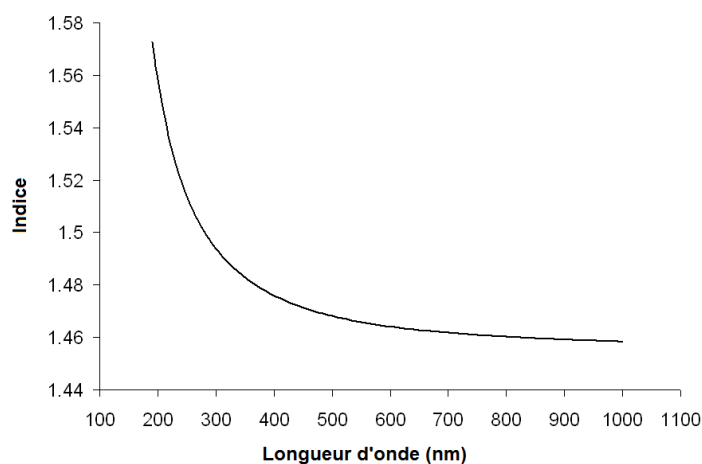


**Figure 3-12 : Image obtenue par microscopie électronique à balayage d'un réseau de contact gravé sur un échantillon de TEOS.**

Ce type de mesure, bien que rapide, ne permet donc pas un contrôle tridimensionnel de la forme des contacts notamment sur la cylindricité et la profondeur. De plus, un seul contact (ou une moyenne de 9) étant analysé, la mesure est très localisée et peut ne pas représenter la forme moyenne des contacts électriques sur l'ensemble du wafer. Pour pallier ces limitations, une mesure par scatterométrie est réalisée.

#### 3.4.1.2 Mesures d'indice et d'épaisseur par ellipsométrie

La mesure de scatterométrie nécessite la résolution d'un problème inverse avec multiples variables ou paramètres. Afin de réduire le nombre d'inconnues et ainsi obtenir une solution réaliste, il est nécessaire de connaître de manière précise les propriétés des matériaux. Une première mesure d'ellipsométrie est donc effectuée avant la première étape de photolithographie pour connaître l'indice optique de la couche de TEOS ainsi que son épaisseur. Cette mesure est réalisée sur le même bâti que la scatterométrie (KLA-TENCOR, Opti-Probe 7341). Elle permet de déterminer l'indice optique complexe du TEOS dont la partie réelle est représentée sur la Figure 3-13 (la partie imaginaire est nulle sur la gamme de longueur d'onde considérée).



**Figure 3-13 : Partie réelle de l'indice mesuré sur la couche en TEOS (avant l'étape de photolithographie) en fonction de la longueur d'onde.**

Comme mentionné précédemment, on détermine également par cette technique l'épaisseur de la couche déposée. En mettant en regard les épaisseurs mesurées présentées sur la Figure 3-14 avec la cartographie des pointés de mesures sur le wafer présenté par la Figure 3-3, on note immédiatement que le dépôt d'oxyde n'est pas uniforme. Les points de mesures en bord de wafer numérotés de 6 à 9, présentent un comportement significativement différent des points centraux avec un écart d'épaisseur pouvant atteindre  $170 \text{ \AA}$  (entre les points 2 et 8) soit un écart de 3,5% par rapport à l'épaisseur moyenne déterminée. L'épaisseur est également un paramètre qui peut être obtenu via l'analyse par scatterométrie. Cependant, différentes étapes de fabrication séparent ces deux mesures et une modification de l'épaisseur peut survenir. Les valeurs fournies par les deux techniques seront présentées lors de la partie consacrée aux mesures par scatterométrie.

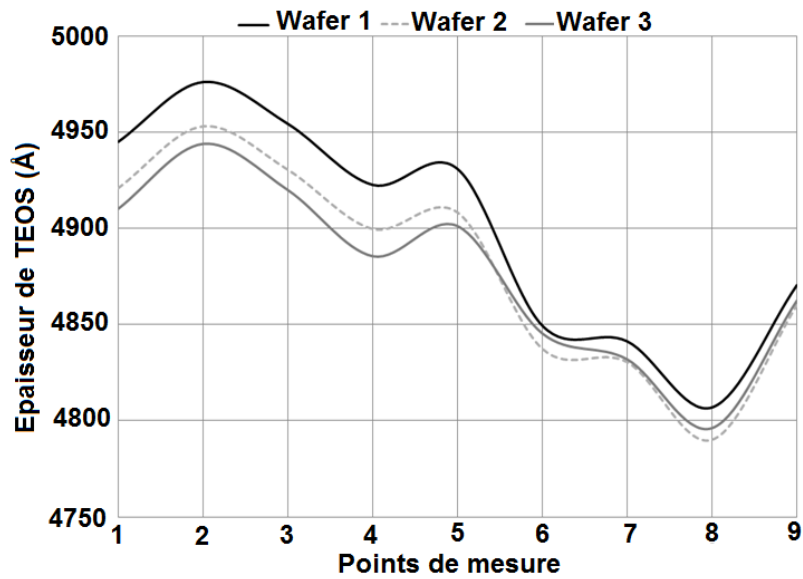


Figure 3-14 : Epaisseur relevée sur trois plaques de la couche de TEOS.

#### 3.4.1.2.1 Mesures dimensionnelles par scatterométrie

Une fois l'épaisseur et l'indice du matériau connus, les différentes étapes de fabrication des trous de contact peuvent être réalisées : dépôt de résine photosensible, exposition via le masque présentant les structures de mesures, gravure physico-chimique et enfin le retrait de la résine puis le nettoyage.

Une série de mesures sur l'ensemble des structures présentes sur le wafer est effectuée, soit 29 mesures pour ces échantillons. Leur localisation sur le wafer est présentée sur la Figure 3-15.

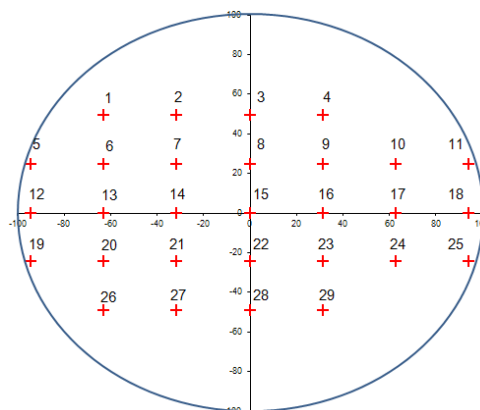


Figure 3-15 : Cartographie des zones de mesures sur un wafer 200 mm en scatterométrie.

L'ensemble des données issues des mesures d'ellipsométrie, incluant les données sur les indices et les épaisseurs précédemment déterminées, est collecté et analysé via le logiciel IRACE™. La résolution du problème inverse nécessite également la modélisation théorique initiale de la forme géométrique des contacts. Dans ce cadre, ce modèle est assez précis et proche de la réalité car il permet d'utiliser comme paramètres initiaux les données théoriques visées pour la fabrication et les mesures réalisées par les techniques de microscopie TEM. En effet, empiriquement, la résolution du problème inverse converge plus rapidement vers une solution physique lorsque le modèle de départ est proche de la réalité.

Pour débiter la modélisation, on pose comme hypothèse que la dimension caractéristique des contacts est d'environ 120 nm de diamètre et leur forme est légèrement en forme en tonneau (un peu plus étroit au centre qu'en haut). De plus, on suggère une légère sur-gravure en haut du contact avec un diamètre plus important en haut par rapport au diamètre du fond de contact. La Figure 3-16 représente la forme de départ d'un contact. Sur cette figure n'apparaît pas l'ellipticité qui est également déterminée et qui permet d'avoir une information tri-dimensionnelle.

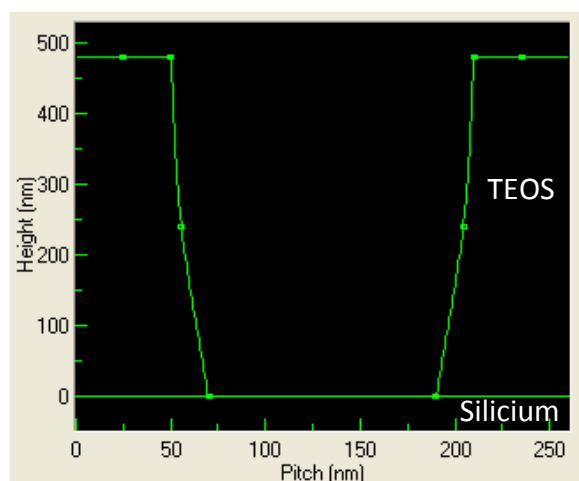
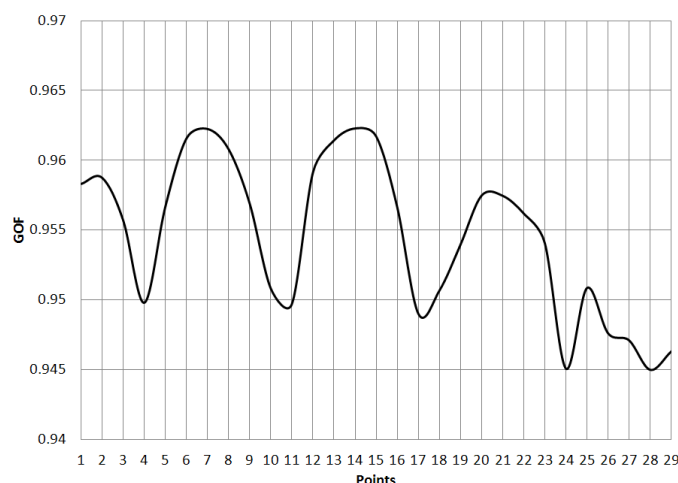


Figure 3-16 : Modèle initial de l'empilement TEOS sur silicium cristallin.

Un ensemble de paramètres numériques et géométriques est à prédéfinir. Il sera détaillé dans la partie liée à l'optimisation du temps de calcul. Concernant les

résultats obtenus par scatterométrie, on analyse tout d'abord le critère de convergence. Celui-ci est fourni par la Figure 3-17.



**Figure 3-17 : GOF pour une mesure de scatterométrie (Wafer 1).**

La valeur moyenne du GOF est de 0,954 avec un écart type de 0,006. A titre d'exemple, le GOF moyen d'une mesure au niveau de la grille dont l'échantillon est constitué d'un réseau de lignes rectangulaires en polysilicium sur un substrat en silicium est de 0,983 avec un écart type de 0,001. Il est important de noter que la plupart des paramètres d'optimisation utilisés en production sont souvent fixés. Ceci permet une meilleure répétabilité de la reconstruction.

Dans le cadre d'une étude de faisabilité, nous allons déterminer les paramètres prépondérants en optimisant au maximum le temps d'analyse et le critère de convergence.

Les résultats obtenus incluent pour l'ensemble des points de mesures différentes informations :

- épaisseur de TEOS (qui sera comparée à la mesure d'épaisseur par ellipsométrie) ;
- ellipticité du trou de contact ;
- diamètres à 5%, 50% et 95% de la hauteur.

Concernant l'épaisseur de TEOS, les résultats obtenus selon les deux techniques, ellipsométrie par polariseur tournant et scatterométrie à partir de

mesure d'ellipsométrie spectroscopique dans des zones proches physiquement sur le wafer sont réunis sur le Tableau 3-8. Par exemple, le point n°1 mesuré en ellipsométrie par polariseur tournant est proche du pointé de mesure n°15 de la cartographie dédiée à la scatterométrie. L'épaisseur fournie par la scatterométrie est quasi-systématiquement surestimée de plusieurs nanomètres. Mais l'erreur est assez faible, de moins de 5 %. Les étapes de fabrication entre la croissance de l'oxyde et la mesure de scatterométrie sont une étape de photolithographie et une étape de gravure. Aucun de ces procédés ne peut expliquer l'augmentation de l'épaisseur de TEOS. Par contre, empiriquement, l'analyse par scatterométrie surestime artificiellement les épaisseurs d'oxyde de silicium.

Avant photolithographie		Après gravure		Ecart entre les épaisseurs (%)
N°	Epaisseur (nm)	N°	Epaisseur (nm)	
1	495	15	510	3,0
2	498	16	502	0,8
3	495	3	500	1,0
4	492	14	512	3,9
5	493	28	490	0,6
6	485	4	495	2,0
7	484	1	505	3,8
8	481	26	490	1,8
9	487	29	492	1,0

Tableau 3-8: Mesures d'épaisseurs avant l'étape de photolithographie et après l'étape de gravure.

Les résultats bruts des diamètres obtenus par scatterométrie sont donnés pour chaque point de mesure dans le Tableau 3-9. Au préalable, il est possible de comparer ces diamètres avec les mesures effectuées au CDSEM. En observant les mesures effectuées dans les mêmes champs et pour le même wafer, il y a une grande différence de valeurs entre les deux techniques. L'écart moyen entre ces deux relevés est de 23,4 %. Comme expliqué précédemment, la mesure CDSEM, bien que fiable dans certains cas, montre ses limites pour les mesures de cylindres.

## Chapitre 3 : Application de l'ellipsométrie et de la scatterometrie pour la caractérisation de structures géométriques

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
5%	133	134	134	136	133	135	135	135	134	136	142	134	135	135	136
20%	138	138	138	140	138	139	139	139	139	140	144	138	139	139	140
50%	147	147	147	147	147	147	148	147	147	147	150	147	147	147	147
80%	156	156	156	154	156	155	156	155	156	154	155	156	155	156	155
95%	161	160	160	158	161	159	160	159	160	158	157	160	159	160	159
CDSEM		100					109		103		104				109
Erreur (%)		25.3					19.1		23.3		26.7				19.6

	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29
5%	134	137	144	135	133	133	134	135	135	142	139	142	133	141
20%	139	140	146	139	138	138	138	139	140	145	142	144	137	144
50%	147	147	150	147	147	147	147	147	148	151	149	149	147	149
80%	156	154	154	155	156	156	156	155	156	157	156	153	156	155
95%	160	158	156	159	161	161	160	159	160	160	159	156	161	158
CDSEM									105	104		106	104	
Erreur (%)									22.5	26.8		25.4	21.5	

**Tableau 3-9 : Diamètres mesurés selon le pourcentage de hauteur pour chaque point de mesure (slot 1), l'erreur est calculée entre la valeur à 5% de la hauteur et celle mesurée par CDSEM.**

### 3.4.1.3 Comparaison avec des mesures par Microscopie Electronique à Transmission

Pour valider les mesures précédentes et afin d'avoir une vision plus précise de la géométrie d'un contact, une mesure par TEM est réalisée. Cette technique présente l'avantage d'avoir une résolution inférieure au nanomètre pour une erreur de quelques pour cent. Néanmoins, cette mesure est destructive, et ne peut donc pas être utilisée systématiquement en production. Autre inconvénient, cette mesure est très localisée, et donc seulement un ou deux contacts seront mesurés alors que la scatterometrie en mesure en moyenne plusieurs milliers. Afin d'avoir une vue globale d'un contact, le wafer est donc coupé et les images obtenues sont présentées sur la Figure 3-18.

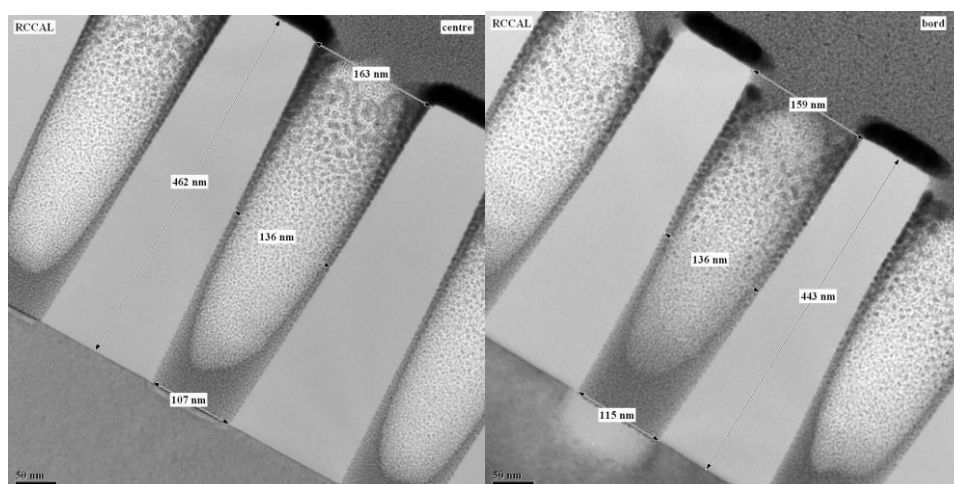


Figure 3-18 : Coupe TEM dans une mire constituée de trous de contact et destinée à des mesures de scatterométrie, à g. : au centre de la plaque, à d. : en bord de wafer.

Le tableau ci-dessous présente les géométries mesurées par coupe TEM et par scatterométrie sur le même champ. Les analyses portent sur une sélection de dimensions permettant de décrire la forme générale du trou cylindrique. On note ainsi la dimension critique du fond de contact «  $CD_{\text{BOTTOM}}$  », le diamètre intermédiaire à 50% de la hauteur, «  $CD_{\text{MIDDLE}}$  » et le CD haut, «  $CD_{\text{TOP}}$  ». On note immédiatement une très bonne concordance des mesures des  $CD_{\text{TOP}}$  et  $CD_{\text{MIDDLE}}$  entre les deux techniques. L'écart est inférieur à 1,3%, sachant que l'incertitude sur les mesures de microscopie électronique à transmission est de l'ordre de 5%, ces valeurs sont similaires. Mais, l'écart sur la valeur du  $CD_{\text{BOTTOM}}$  est élevé, supérieur à 17%. Le modèle permettant l'analyse scattérométrique ne résout pas convenablement ce point du profil. L'épaisseur déterminée par ces deux techniques est par contre semblable.

	TEM	Scatterométrie	Ecart entre TEM et la scatterométrie(%)
<b><math>CD_{\text{TOP}}</math> (nm)</b>	157	158	0,6
<b><math>CD_{\text{MIDDLE}}</math> (nm)</b>	151	149	1,3
<b><math>CD_{\text{BOTTOM}}</math> (nm)</b>	117	141	17,0
<b>Epaisseur (nm)</b>	486	492	1,3

Tableau 3-10 : Comparaison des paramètres mesurés à partir de la coupe TEM avec la reconstruction par scatterométrie.



#### 3.4.1.4 Optimisation des paramètres de calcul pour la scatterométrie

L'ensemble des paramètres disponibles pour l'optimisation (via le logiciel IRACE) nécessite de fixer un certain nombre de paramètres de différents types : géométriques, optiques ou liés à la méthode de résolution. Afin d'optimiser le temps de calcul sans dégrader les résultats, une étude paramétrique a été réalisée. Une fois les paramètres géométriques fixés, on s'attarde plus particulièrement sur les paramètres du modèle.

Le critère de convergence utilisé par le logiciel représente un pourcentage d'erreur entre modèle et mesure dont la définition est donnée au chapitre 2. Ce paramètre va être privilégié dans cette étude ainsi que le temps de calcul. Il est important de noter que ces critères ne permettent pas d'obtenir avec certitude la convergence vers une géométrie réaliste, uniquement une convergence numérique.

Une étude de sensibilité des résultats aux valeurs géométriques entrées dans le modèle a également été réalisée au préalable. La conclusion est que la précision de la convergence est fortement dépendante de l'empilement initial.

En utilisant les paramètres ellipsométriques récoltés sur les deux plaques comportant une couche de TEOS et des paramètres géométriques donnant des résultats cohérents, on réalise une pré-étude permettant de mettre en évidence l'influence de certains paramètres sur la rapidité de convergence du calcul.

La liste des paramètres testés dans cette partie est intimement liée à l'algorithme de résolution et aux paramètres de mesures. Néanmoins, peu d'informations sont fournies par l'équipementier sur la méthode de calcul. On peut tout de même extraire les facteurs prédominants :

Nombre maximal d'itérations :            Nombre d'itérations maximal utilisé pour la reconstruction géométrique. Si cette valeur

est trop faible, le calcul ne converge pas. A l'inverse, après la convergence, les itérations suivantes ne permettent plus d'améliorer la résolution sur les dimensions géométriques mais augmentent le temps de calcul ;

Technologie :

Les ellipsomètres Therma-Wave sont dotés de deux équipements permettant l'analyse par scatterométrie ; un ellipsomètre spectroscopique (SE) ou un spectromètre large bande (BB). Nous utiliserons ici uniquement la configuration SE;

Nombre d'ordres :

Nombre d'harmoniques considérées pour la reconstruction de Fourier. Il est lié principalement aux matériaux et à la géométrie du réseau (ratio entre la dimension critique et la période du réseau). Cette valeur définit la qualité de la convergence et est proportionnelle au temps de calcul ;

Nombre de processeurs :

Plus le calculateur possède de processeurs, plus le calcul sera rapide. Dans notre cas, le calculateur possède 16 processeurs dont 8 virtualisés ;

Modèle utilisé :

Méthode de calcul du problème direct des paramètres ellipsométriques, par exemple la méthode RCWA [43] ;

Algorithme d'inversion : Algorithme d'optimisation, cinq sont disponibles, par exemple la méthode Levenberg-Marquardt [29] ;

Nombre de  $\theta$  ou de  $\phi$  : Représente le nombre d'angles d'incidence ( $\theta$ ) ou d'azimuth ( $\phi$ ) utilisé dans l'intégration numérique des paramètres spectroscopiques ;

Échantillonnage en  $\lambda$  : La mesure se fait de 200 à 800 nm par un pas de 1 nm. Ce paramètre permet d'augmenter le pas lors du traitement des spectres.

Parmi cette sélection de paramètres dont la définition va intrinsèquement impacter la qualité de la convergence et le temps de calcul, on peut extraire une liste resserrée dont la contribution va être déterminante pour la qualité du calcul de reconstruction. Le Tableau 3-11 présente les résultats qualitatifs et empiriques obtenus à partir de la contribution de ces variables sur la convergence.

Paramètres	Impact sur la convergence	Impact sur la réduction du temps de calcul
Nombre d'itérations maximal	+	0
Nombre d'ordres	+	+
Nombre de processeurs	Aucun	+
Nombre de $\theta$ ou de $\phi$	0	-
Echantillonnage en $\lambda$	0	-

Tableau 3-11 : Influence des paramètres du modèle sur la convergence  
 (- : impact faible, 0 : impact intermédiaire, + : impact fort)

Pour la suite, l'ensemble des paramètres sélectionnés pour une application donnée sera appelé « recette ». En fixant un premier jeu de paramètres, regroupé

sous le nom de « recette standard », une étude d'optimisation du temps de calcul est réalisée. L'objectif est de pouvoir réduire de façon significative le temps de calcul tout en maximisant le critère de convergence.

Dans un premier temps, chaque paramètre est testé séparément avec des valeurs jugées raisonnables grâce à des essais préliminaires. Les résultats sont compilés dans le Tableau 3-12. Comme annoncé précédemment, le temps de calcul par zone de mesure est intimement lié au nombre d'ordres ainsi qu'au nombre d'itérations maximal. Il serait donc judicieux de les diminuer au maximum mais la qualité de la convergence va également être impactée. Sur ces deux éléments, on pourrait perdre un demi-point sur le critère de convergence. Or il semble très difficile d'améliorer ce paramètre. Un compromis doit donc être trouvé.

recette	Calcul Standard nbre de $\theta = 2$ nbre de $\phi = 4$ Max_itérations = 2 ordres = 5	Variation du pas en longueur d'onde		Variation du nombre d'ordres		Variation du nombre maximal d'itérations	
		$\lambda = 10$	$\lambda = 20$	ordres = 3	ordres = 7	itérations = 5	itérations = 11
temps moyen par point (s)	35	19	13	4	220	63	125
Ecart par rapport au STD (s)	-	-16	-22	-31	185	28	90
GOF moyen (sur 29 points)	95,92%	96,06%	95,58%	95,26%	96,43%	96,01%	96,10%
Gain sur le GOF	-	0,14%	-0,33%	-0,66%	0,51%	0,10%	0,18%

Variation du nombre d'angle $\phi$			Variation du nombre d'angle $\theta$			Variation du nombre maximal d'itérations & du nombre d'ordres	
nbre de $\phi = 1$	nbre de $\phi = 2$	nbre de $\phi = 3$	nbre de $\theta = 1$	nbre de $\theta = 3$	nbre de $\theta = 4$	itérations = 5 ordres = 3	itérations = 11 ordres = 3
17	17	35	17	50	64	7	13
-18	-18	0	-18	15	29	-28	-22
94,38%	95,40%	95,93%	93,29%	96,15%	95,92%	95,45%	95,52%
-1,54%	-0,52%	0,01%	-2,63%	0,24%	0,00%	-0,47%	-0,40%

Tableau 3-12 : Impact d'une variation sur un des paramètres sélectionnés sur le temps de calcul et sur le critère de convergence (GOF).

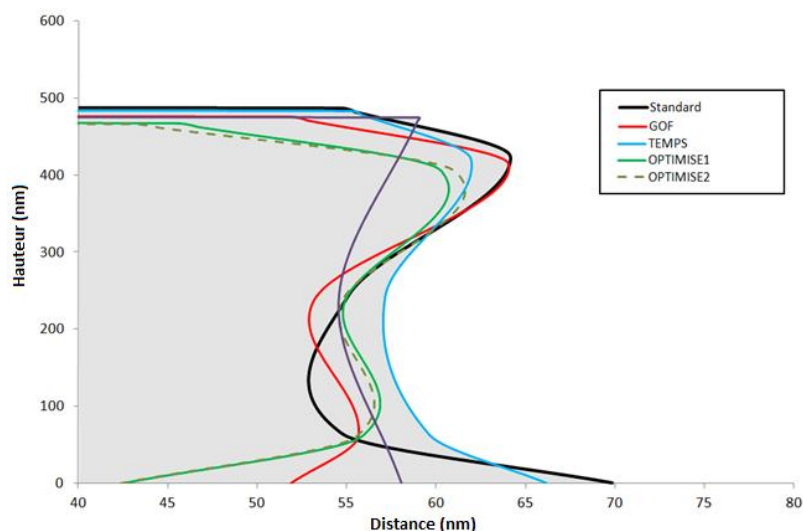
Quelques exemples de recettes optimisées sont présentés dans le Tableau 3-13. La recette dite « idéale » en temps de calcul et celle permettant d'obtenir un critère de convergence maximisé sont des cas extrêmes permettant de borner le

domaine d'étude. Deux jeux de paramètres optimisés, c'est à dire permettant un bon compromis en termes de temps de calcul et de convergence présentée Tableau 3-12 sont également présentés.

Recette idéale	Recette optimisée en temps de calcul	Recette optimisée en critère de convergence	Recette Optimisée 1	Recette Optimisée 2
nombre de $\theta = 1$	1	3	2	4
nombre de $\phi = 1$	2	3	2	4
Max_itérations	2	11	5	5
n° Ordres	3	7	3	3
$\lambda$	20	10	10	10
Temps moyen par point (s)	0,3	720	1,6	6,4
Ecart par rapport au calcul standard (s)	-34,7	685	-33,4	-28,6
GOF moyen (sur 29 points)	92,57 %	97,01 %	95,08 %	95,43 %
Gain sur le GOF	-3,35 %	1,09 %	-0,84 %	-0,49 %

Tableau 3-13 : Recettes optimisées selon les résultats précédents.

On améliore facilement le temps de calcul par rapport à la recette standard sans dégrader considérablement le critère de convergence. Cependant, dans cette partie, on a négligé l'impact de ces paramètres sur la géométrie globale des contacts. En effet, si on trace sur un même graphique les profils des contacts reconstruits, (cf la Figure 3-19), des différences notables apparaissent. Par exemple, la présence ou non de points d'inflexion modifie la forme du contact de façon notable.



**Figure 3-19 : Formes géométriques du bord d'un demi-contact selon les différentes recettes de mesures (standard, optimisée en GOF et en temps de calcul, et celles permettant le meilleur compromis (optimisées 1 et 2)).**

#### 3.4.1.5 Conclusion

La technique de reconstruction par scatterométrie permet à partir de mesures d'ellipsométrie spectroscopique sur des réseaux périodiques de reconstruire des formes géométriques variées. Dans cette partie, l'évaluation de la reconstruction de trous de contacts cylindriques a été réalisée. La scatterométrie présente l'avantage par rapport aux mesures par microscopies électroniques de fournir une information sur la forme des structures étudiées moyennées sur plusieurs centaines de structures. Pour avoir un résultat fiable dans des temps de calculs en accord avec les contraintes industrielles, une étude portant sur l'optimisation des paramètres de reconstruction est réalisée. Elle porte sur l'équilibre à définir entre la maximisation du critère de convergence et la minimisation du temps de reconstruction. Il est cependant important de ne pas négliger les profils générés qui doivent avoir une réalité physique.

### 3.4.2 Etude de sensibilité des variations géométriques

Il est important d'étudier la sensibilité de la recette à détecter et mesurer des variations géométriques sur une série d'échantillons. Ainsi, deux jeux de quatre wafers sont fabriqués, trois wafers avec différents CD, et un wafer dont le temps de gravure a été réduit passant de 70 à 40 secondes. Ceci devrait permettre de tester la sensibilité de la recette à la présence d'oxyde en fond de contact (trous dits non débouchant).

#### 3.4.2.1 Echantillons et localisations

Sur chaque plaque, douze mesures sont effectuées selon la cartographie fournie par la Figure 3-20.

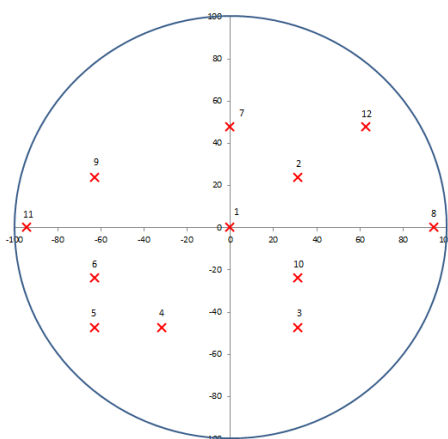


Figure 3-20 : Positionnement des champs mesurés.

Les échantillons peuvent être regroupés deux à deux selon leur géométrie :

- slots 1 et 5, dimension standard (CD visé autour de 120 nm) ;
- slots 2 et 6 (CD plus petit autour de 110 nm) ;
- slots 3 et 7 (dimension standard mais gravure plus courte) ;
- slots 4 et 8 (CD plus grand autour de 130 nm).

A noter que le terme de « slot » correspond à l'emplacement des wafers au sein de la boîte de manutention. Pour simplifier la nomenclature, le wafer présent dans le slot numéroté 1, devient le « slot 1 ».

Comme précédemment, les mesures par scatterométrie vont être comparées à des mesures CDSEM et TEM.

#### 3.4.2.2 Bilan des mesures

Afin de comparer l'ensemble des techniques et de valider l'utilisation de la scatterométrie pour ces mesures, on réalise sur chaque wafer :

- une mesure de microscopie électronique du diamètre intérieur des trous de contacts, dans la mire dédiée ;
- une mesure par scatterométrie dans la mire dédiée ;
- sur les slots 5, 7 et 8 sont réalisées deux coupes TEM au centre du wafer :
  - o une dans la Mesdim (dédiée aux mesures de CDSEM) ;
  - o une autre dans la mire de scatterométrie.

Une mesure de répétabilité est également réalisée en CDSEM et en scatterométrie sur le slot 1. Elle consiste en la mesure du champ de coordonnées (0 ; 0) nommée 1 sur la Figure 3-20 dix fois de suite. Cette mesure permettra d'estimer la répétabilité intrinsèque de l'équipement et du traitement des données.

A partir des mesures CDSEM, présentées sur la Figure 3-21, on retrouve la répartition deux par deux des échantillons selon la dimension du diamètre des contacts. Les slots 3 et 7 présentent un CD nettement plus faible et une reproductibilité du procédé de fabrication moins évidente qu'attendue. Les dimensions pour ces deux plaques étant standards, on aurait pu s'attendre à une reproductibilité meilleure. Mais ce résultat était prévisible de par la nature de la modification effectuée sur ces échantillons. En effet, le temps de gravure a été réduit permettant la réduction de la taille des contacts mais cette procédure n'est pas bien contrôlée.



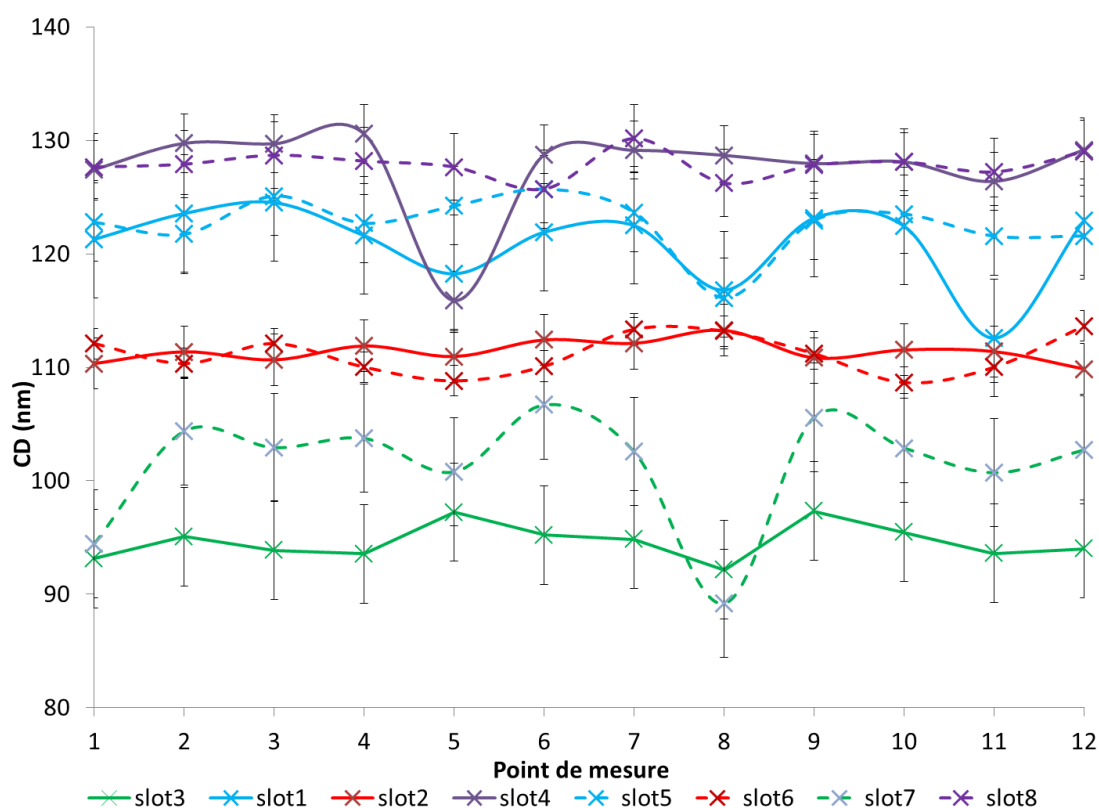


Figure 3-21 : Valeurs des CD « bas » mesurés par CDSEM au sein des mires scattérométriques.

En prenant le diamètre du fond de contact et en comparant les résultats obtenus via les mesures par microscopies électroniques, on obtient une très bonne concordance entre les différentes techniques de mesure. Le Tableau 3-14 regroupe ces informations géométriques. On y note tout de même un plus grand écart obtenu pour les slots 3 et 7, dont la gravure a été plus courte. Cette constatation est également à mettre en regard avec les écarts-types relevés sur ces mesures. La valeur de la dispersion  $3\sigma$  sur ces deux wafers est de 14 et 15 nm, soit le triple du procédé standard. C'est assez cohérent, la gravure n'étant pas maîtrisée.

Echantillons	CDSEM	Scatterométrie		CDTEM			
	CD	CD	Epaisseur gravée	Epaisseur non gravée	CD	Epaisseur gravée	Epaisseur non gravée
slot1	121	106	539	0	-	-	-
slot2	111	97	547	0	-	-	-
slot3	95	93	531	20	-	-	-
slot4	128	117	533	0	-	-	-
slot5	123	101	547	0	105	534	-
slot6	111	97	549	0	-	-	-
slot7	101	88	526	11	67	524	35
slot8	128	109	547	0	102	553	-

**Tableau 3-14 : Mesure du CD bas et de l'épaisseur dans les mires scattérométriques selon différentes techniques (moyenne des valeurs obtenues par wafers, sauf pour le TEM). Les valeurs sont exprimées en nanomètre.**

Grâce à l'apport d'information sur la géométrie fourni par les coupes TEM, on valide que les échantillons avec un temps de gravure plus court ne sont pas débouchant sur le silicium cristallin. La Figure 3-22 montre localement une épaisseur restante de 35 nm. Cette valeur est cependant sujette à caution :

- elle est mesurée sous un seul contact ;
- les variations d'épaisseurs lors du dépôt de TEOS sont importantes sur l'ensemble du wafer avec un écart entre le centre et le bord d'une dizaine de nanomètre (cf Figure 3-14) ;
- à partir du traitement manuel d'une vue d'ensemble de la coupe TEM, on obtient, sous les contacts les plus proches, des valeurs autour de 16 nm.

Il est donc difficile de déterminer de manière absolue l'épaisseur de TEOS restante via cette méthode et de prendre cette valeur comme référence pour valider ou non les résultats obtenus par scatterométrie.

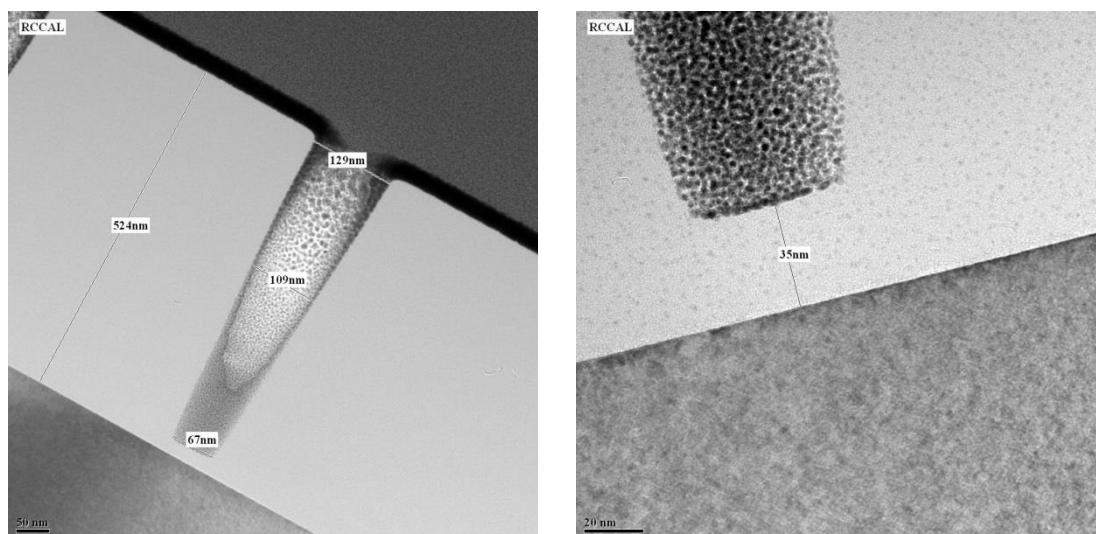


Figure 3-22 : Coupe TEM d'un contact non débouchant : à g. vue d'ensemble, à d. zoom sur la partie inférieure.

L'intérêt principal de la métrologie, dans le cadre du contrôle de procédés, réside dans la détermination précise de la dispersion des mesures sur les échantillons. Afin d'évaluer si la scatterométrie apporte un gain de ce point de vue, les écarts-type sont comparés par techniques d'analyses. Ces valeurs sont réunies dans le Tableau 3-15.

	CDSEM			TEM		Scatterométrie			Gain	Ellipsométrie
(nm)	1 contact	9 contacts	gain	CD	Epaisseur	min	max	moyen	Scatterométrie vs CDSEM (1 contact)	Epaisseur
STD moyen relevée sur la fabrication	3 nm								-	-
STD répétabilité	2,3	1,6	30%	-	-	0,1	1,1	0,6	74%	0,03
STD intra plaque	3,5	2,9	17%	-	-	0,7	10,4	5,0	-43%	6,7
STD traitement	0,3	0,3	-	3	18	<0,1	1,1	0,6	-100%	négligeable
STD total	5,2	4,5	13%	3	18	3,1	10,9	5,9	-1%	

Tableau 3-15 : Bilan des écarts-type (STD pour « STandard Deviation ») selon les techniques de mesure.

La valeur de l'écart-type moyen attribuée au procédé de fabrication est de 3 nm. Cette valeur compile une étude de suivis de lots en fabrication durant trois mois (de novembre 2012 à janvier 2013) sur une quinzaine de lots aux dimensions proches de nos échantillons. Pour comprendre cette valeur, nous allons identifier les différentes contributions induisant un écart dans les procédés de fabrication en isolant uniquement l'étape de gravure :

- utilisation de deux chambres de gravure différentes ;
- mesures réalisées sur deux CDSEM différents.

Cette information est importante car on peut déjà prendre en compte un facteur induisant une augmentation de la dispersion sur un grand nombre d'échantillons : l'impact de l'utilisation de différentes machines de gravure. En effet, les deux chambres, bien que semblables, ne donnent jamais un résultat parfaitement identique. Empiriquement, et dans des conditions normales de production, la dispersion introduite par l'utilisation de différentes chambres de gravure est de l'ordre de 0,5 nm. A cela, s'ajoute l'impact des variations des procédés de fabrication à proprement parler. Il peut s'agir, par exemple, d'une différence de comportement entre le centre du wafer et le bord. Pour la gravure de trous de contacts, on considère cette contribution à la dispersion de plus de 2 nm.

L'écart type lié à la répétabilité est déterminé grâce à une série de dix mesures sur la même mire et dans les mêmes conditions expérimentales. On obtient ainsi la dispersion dû à l'équipement de mesure uniquement.

Concernant les mesures de microscopie électronique à balayage, le fait de moyenner la valeur de diamètre obtenue sur neuf trous de contacts au lieu d'un seul améliore la dispersion de 30%. En s'intéressant à la scatterométrie, le gain par rapport à la mesure par CDSEM portant sur un contact est de 74%. Ce gain en répétabilité est l'une des principaux atouts de la scatterométrie.

A l'inverse, lorsque l'on s'intéresse aux variations intra-plaques, qui se concentrent sur les variations entre les différentes mesures effectuées sur un même

wafer, l'écart entre la dispersion intra-plaque pour la scatterométrie et la mesure de CDSEM sur un contact est de -71%. La scatterométrie est plus sensible aux variations géométriques telles que les non-uniformités du dépôt TEOS sur l'ensemble du wafer, par conséquent la dispersion intra-plaque est dégradée par une plus grande qualité de mesure.

L'écart-type dénommé « traitement » correspond à l'erreur apportée par la recette d'analyse utilisée (algorithme de détection de contour pour le CDSEM, mesure avec curseur manuel pour le TEM, modèle de dispersion et paramètre de reconstruction pour la scatterométrie).

#### 3.4.2.3 Conclusion

Des variations physiques et maîtrisées sur les dimensions ont été appliquées sur différents wafers et ont pu être caractérisées selon différentes techniques. La plus grande difficulté dans ces comparaisons réside dans les limitations de chaque équipement de mesure. En effet, les mesures de microscopies électroniques peuvent être très résolues mais localisées sur un seul contact (ou quelques-uns) alors que la scatterométrie va moyenniser plusieurs centaines de contacts et donner une information plus complète de la forme générale des contacts.

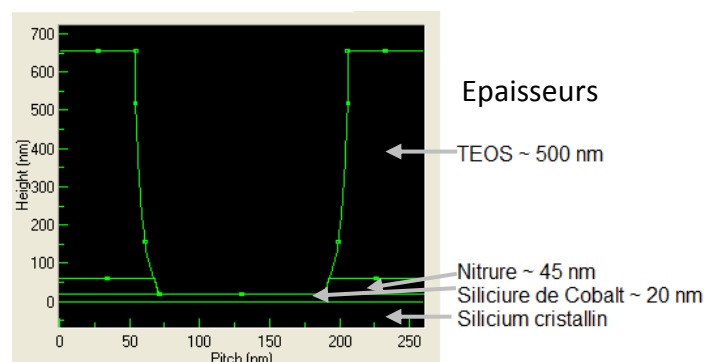
Une étude de la dispersion a été menée sur chacune des analyses afin d'évaluer les sources de variabilité. La scatterométrie présente l'avantage d'être une technique avec une très bonne répétabilité, meilleure que celle des techniques par microscopie. En contrepartie, on obtient un résultat plus complet, mais ce surplus d'informations augmente la dispersion sur un wafer complet. Comme nous nous intéressons au diamètre, l'impact de la variation de l'épaisseur n'est pas nécessaire et parasite l'écart type de cette mesure.

Les premiers tests réalisés montrent la faisabilité de la détection de contacts non débouchant sur le substrat en silicium. Cependant, la recette est limitée par une répétabilité de plus d'une dizaine de nanomètres et par son incapacité à contrôler

des contacts débouchant. Cette limitation induit la réalisation de deux mesures successives, difficilement applicable en production.

#### 3.4.2.4 Caractérisation d'un empilement complet

En production, le bloc correspondant à la zone où se trouvent les contacts est constitué non pas d'une seule couche de TEOS mais de trois couches de matériaux dont les indices optiques sont complexes (nitrure et siliciure de cobalt).



**Figure 3-23 : Empilement et forme constituant les trous de contacts de la mire scatterométrie dédiée à la structure étudiée. La figure indique les matériaux et leur épaisseur (en nm).**

##### 3.4.2.4.1 Récolte de spectres

Un wafer a été mesuré sur tous les champs de photolithographie (31 points). A partir de ces mesures, on reconstruit la structure géométrique de la zone étudiée. D'après le tracé du critère de convergence pour chaque reconstruction (cf Figure 3-24), on remarque que la recette utilisée a une bonne convergence sauf pour le point 27. Plusieurs explications sont possibles, soit un problème de fabrication localisé sur ce point (défaut d'épaisseur, défaut de CD, etc.) soit une erreur de mesure non détectée lors de la récolte de spectres. La Figure 3-25 permet de visualiser les différentes épaisseurs. Hormis le point 27, les épaisseurs sont uniformes sur l'ensemble de wafer avec en moyenne une épaisseur de siliciure de cobalt de 45 nm, une épaisseur de nitrure de 62 nm et une épaisseur de TEOS de 575 nm.

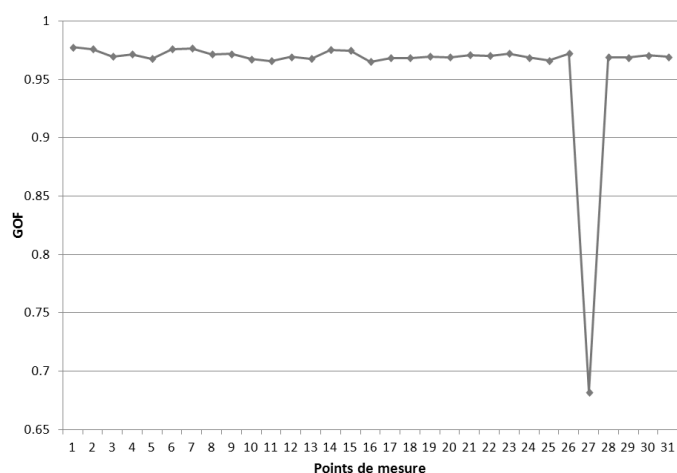


Figure 3-24 : Valeurs du GOF pour chaque point de mesure.

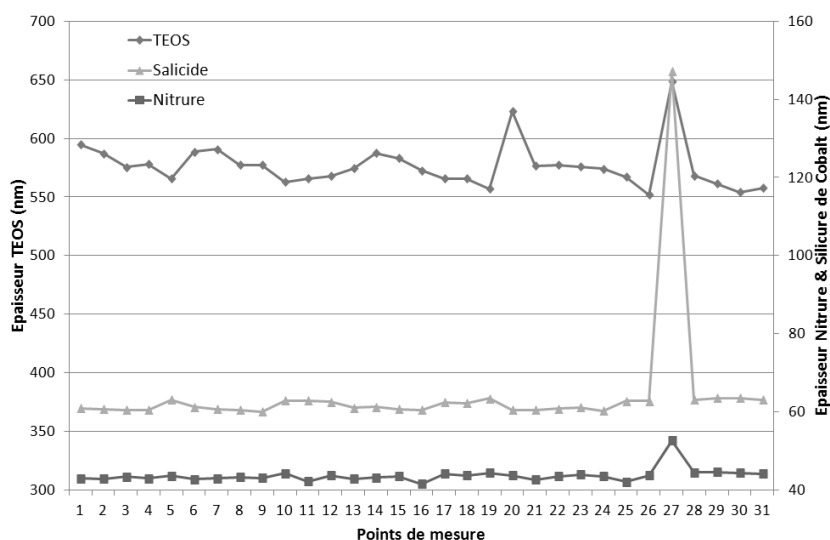


Figure 3-25: Epaisseur des différentes couches pour les 31 points de mesures.

### 3.4.2.5 Optimisation de la recette

En se basant sur les résultats précédents, on peut facilement générer différentes recettes optimisées en temps de calcul. Il est néanmoins plus compliqué de limiter l'impact sur le critère de convergence.

Le paramètre ayant le plus d'impact sur la qualité de la convergence est le nombre d'ordres. D'après les précédentes études, le choix initial s'est porté sur des valeurs comprises entre 3 et 7.

Mais d'après les résultats des études précédentes, la recette ayant le meilleur compromis est celle nommée « recette finale » dans la Tableau 3-16.

Recette idéale	STANDARD	Recette optimisée 1	Recette optimisée 2 (mixing factor)	Recette optimisée 3	Recette Finale
nbre de $\theta$	2	2	2	4	3
nbre de $\phi$	4	2	2	4	4
Max_itérations	5	5	5	5	5
Nombre d'ordres	5	3	3	3	4
$\lambda$	5	10	10	10	20
temps moyen par point (s)	114	1,6	3,3	13	26
Ecart par rapport au STD (s)	-	-112,4	-110,7	-101	-88
GOF moyen (sur 31 points)	95,54%	92,82%	93,40%	93,08%	96,11%
Gain sur le GOF	-	-2,72%	-2,14%	-2,46%	0,57%

Tableau 3-16 : Recette optimisée pour l'empilement de production.

Suite à la création de cette première recette, une analyse est effectuée sur un nouveau wafer du même produit. Ainsi, un premier test de répétabilité et de robustesse constitué de 9 mesures consécutives de 10 points répartis selon la cartographie donnée par la Figure 3-26 a pu être effectué sur cette recette.

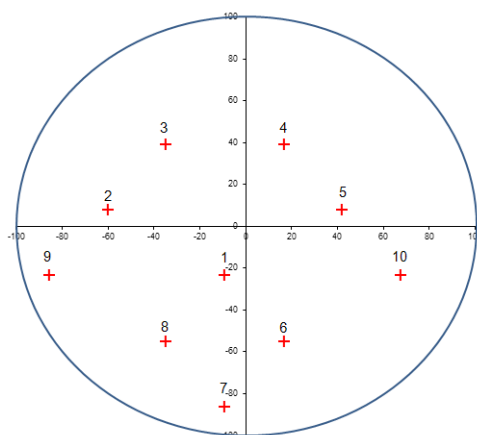


Figure 3-26 : Cartographie des points de mesures sur un wafer 200 mm en scatterométrie.

La dispersion des résultats, dont les dimensions critiques sont présentées sur la Figure 3-27 n'est pas compatible en l'état avec une mise en production de la technique de mesure. Le paramètre  $3\sigma$  est de 9 nm, mais c'est principalement la



répétabilité des mesures qui est à améliorer en optimisant les paramètres de reconstruction.

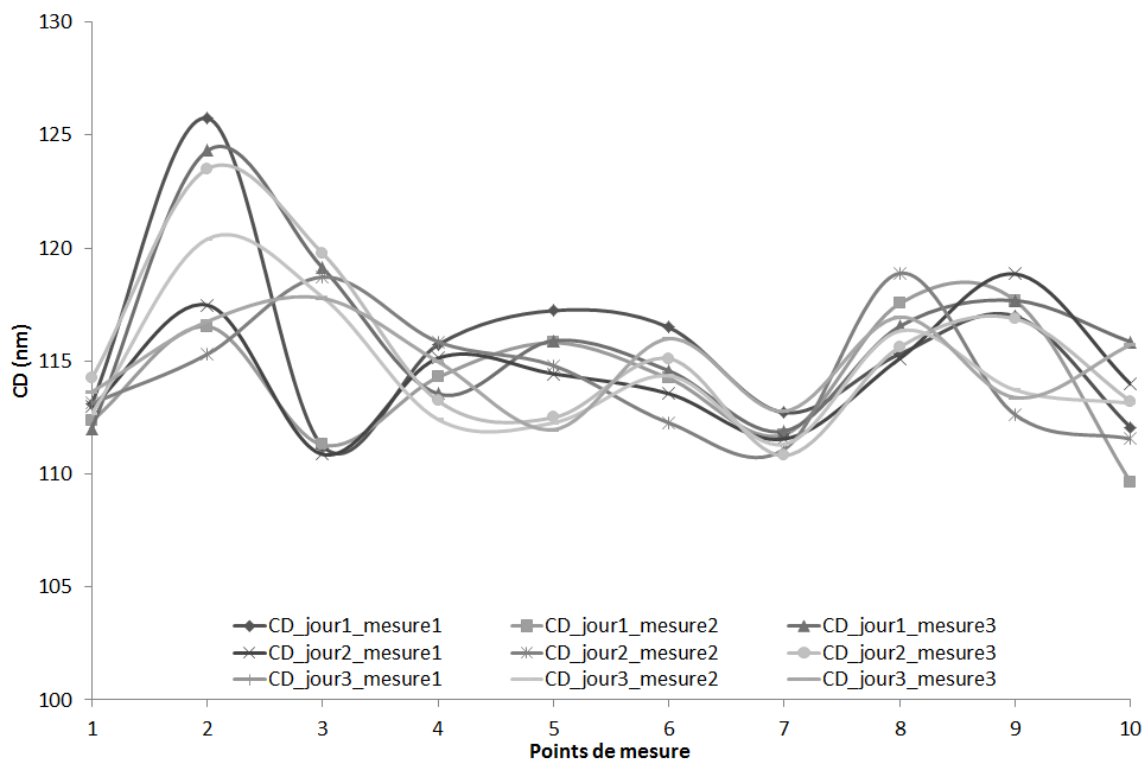


Figure 3-27 : Tests de répétabilité, trois séries de 10 mesures réalisées trois jours consécutifs.

#### 3.4.2.6 Mesure CDSEM

Des mesures par microscopie électronique réalisées dans les mires Mesdim 19 (cf Figure 3-11) permettent d'effectuer une première analyse. Le Tableau 3-17 regroupe les résultats obtenus par CDSEM et les mesures moyennes par scatterométrie selon la cartographie propre à chaque technique. Les mesures effectuées dans les mêmes champs sont surlignées. Les écarts entre les techniques (pour le même champ, ou des champs proches) sont inférieurs à 3%. Le CDSEM donne une mesure moyenne de 116,8 nm avec un écart-type de 1,5 nm. La mesure par scatterométrie moyennée permet d'obtenir une mesure sur l'ensemble de la plaque à 115 nm avec un écart type de 2,3 nm.

	-3		-2		-1		0	
	CDSEM	Recette optimisée	CDSEM	Recette optimisée	CDSEM	Recette optimisée	CDSEM	Recette optimisée
2			118.6			115.8		
1				120.0	117.7			
0	116.6	116.0					114.6	113.0
-1			116.6			116.5		
-2							114.9	111.7

	1		2		3	
	CDSEM	Recette optimisée	CDSEM	Recette optimisée	CDSEM	Recette optimisée
2	117.5	114.4				
1				114.4	116	
0						113.1
-1		114.6	118.6			
-2						

Tableau 3-17: Comparaison de CD obtenu par CDSEM et scatterométrie selon les champs exposés.

### 3.4.2.7 Mesure TEM

La coupe TEM confirme l'empilement. Par contre, les contacts ne sont pas débouchant sur le silicium mais sur la couche de siliciure de cobalt. Deux coupes sont réalisées, l'une dans un champ situé au centre de la plaque et une seconde en périphérie. La Figure 3-28 présente une vue transverse obtenue par TEM et permet de quantifier les différentes dimensions (épaisseurs et diamètres).

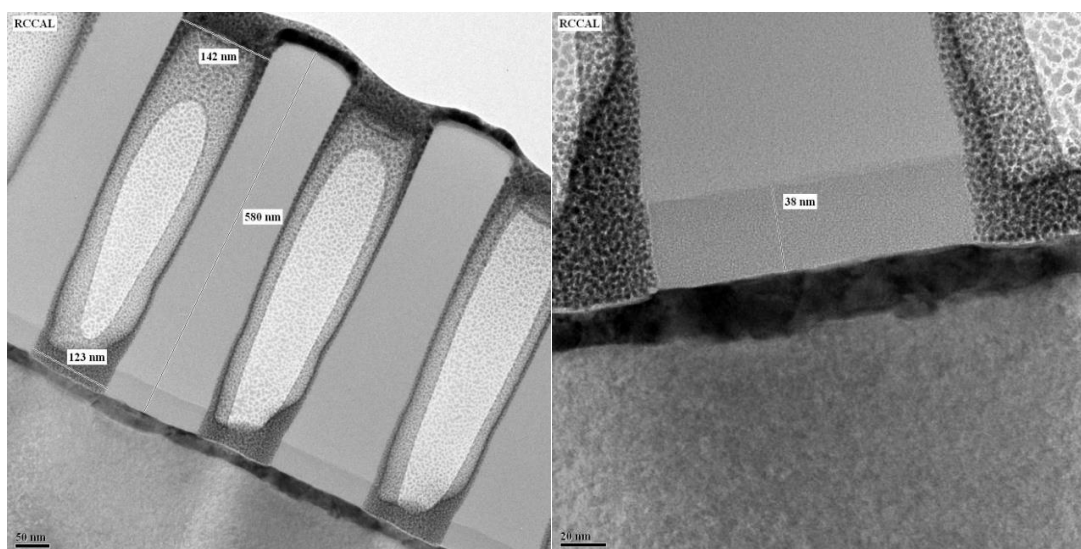


Figure 3-28 : Coupes TEM de la mire scattérométrique en centre plaque, à g. : Vue d'ensemble, à d. agrandissement sur la couche de nitrure (en gris foncé) et la couche de siliciure de cobalt (en noir).

Le Tableau 3-18, réunissant les valeurs obtenues par coupe TEM et scatterométrie sur le même champ, montre que les écarts sont assez faibles, que ce soit pour les diamètres ou pour les épaisseurs, de l'ordre de quelques nanomètres. A noter quelques exceptions où les erreurs sont élevées.

	TEM Centre plaque	Scatterométrie Point 1	Ecart  (%)	TEM Bord plaque	Scatterométrie Point 4	Ecart  (%)
CD <sub>TOP</sub> (nm)	142	150	5,6 %	154	151	1,9 %
CD <sub>BOTTOM</sub> (nm)	127	117	7,8 %	123	119	3,3 %
Epaisseur TEOS (nm)	580	602	3,8 %	608	599	1,5 %
Epaisseur SiN (nm)	38	39	2,6 %	41	39	4,9 %

Tableau 3-18 : Comparaison des résultats de CD et d'épaisseur obtenus par coupe TEM et par scatterométrie (moyenne de 9 mesures aux mêmes points).

#### 3.4.2.8 Conclusion

Comme précédemment, et malgré un empilement plus complexe, la scatterométrie permet avec une légère dégradation de l'écart type sur les mesures intra-plaques d'obtenir beaucoup plus d'informations qu'une simple mesure via CDSEM. L'écart-type pour la mesure via microscopie électronique est légèrement plus faible de 0,8 nm par rapport à l'écart type obtenu par scatterométrie.

Les écarts obtenus avec les mesures TEM sont inférieurs à 8% ce qui est un résultat intéressant, sachant que l'incertitude de mesure sur une coupe TEM est estimée à 5%.

Une étude plus poussée serait à réaliser pour évaluer les possibilités de détection de défauts de fabrication sur les dimensions (étape de photolithographie et/ou de gravure) ou sur l'une des étapes de dépôt.

Une étude sur la détection de variation physique des dimensions afin de tester la sensibilité du modèle de reconstruction pourrait être réalisée.

## Conclusion

L'ellipsométrie est une technique « mature » en termes d'expertise en production. C'est la seule technique d'inspection d'épaisseur utilisée pour tous les dépôts optiquement transparents. D'un point de vue de la recherche, les mesures par ellipsométrie sont un moyen efficace de caractériser optiquement les propriétés d'un matériau et de mesurer des dépôts innovants comme les nanocristaux de silicium. La scatterometrie présente l'avantage de fournir des informations supplémentaires par rapport à la microscopie électronique à balayage. Comme nous l'avons vu, ceci peut être un avantage, mais également une source de variabilité due à la complexité de trouver un point d'équilibre entre l'ensemble des paramètres.

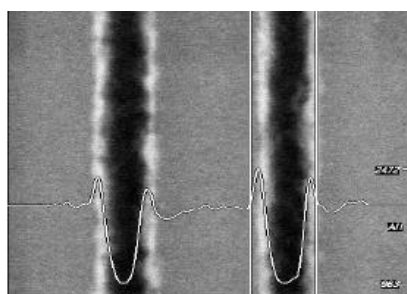
L'ensemble de ces applications montre la nécessité de travailler à l'amélioration continue des techniques de mesure. De plus, avec la complexification de couches minces, il devient de plus en plus difficile d'obtenir des analyses robustes et répétables qui satisfont les contraintes exigeantes de la microélectronique.

## **Chapitre 4 : Détermination de la rugosité sur des réseaux périodiques par analyse multi-échelle**



## Introduction

Les récentes avancées, principalement en photolithographie, ont permis de diminuer de façon significative les dimensions en microélectronique. Celles-ci s'approchent maintenant des 80 nm à STMicroelectronics Rousset et 28 nm à STMicroelectronics Crolles. Ces réductions rendent nécessaire l'amélioration des techniques de métrologie pour le contrôle de fabrication. Comme présenté dans les chapitres précédents, elles ciblent souvent la détermination d'une dimension critique (comme la largeur d'une ligne de silicium poly-cristallin ou le diamètre d'un trou de contact cylindrique). Cependant, cette caractérisation géométrique de la structure n'est pas toujours suffisante. En effet, les matériaux n'étant pas parfaits, les interfaces présentent systématiquement des rugosités, de l'ordre de quelques nanomètres et qui deviennent donc de moins en moins négligeables devant leur taille moyenne.



**Figure 4-1 : Exemple de ligne de silicium poly-cristallin impactée par de la rugosité de bords de ligne (vue de dessus obtenue par CDSEM).**

Ce défaut géométrique a un réel impact sur les capacités électriques d'une puce et peut induire différents problèmes électriques comme des courants de fuites [44]–[46].

Ce chapitre s'intéresse donc à la caractérisation de la rugosité sur des réseaux périodiques que l'on trouve en microélectronique. Plusieurs techniques peuvent être mises en œuvre telles que des mesures de microscopie (AFM, microscopie électronique). Des techniques purement optiques peuvent également être

développées, basées sur l'exploitation de la diffusion lumineuse créée par les hétérogénéités. L'Institut Fresnel développe ces techniques depuis plusieurs dizaines d'années, ce qui a justifié le travail partenarial mis en place avec STMicroelectronics et les deux thèses successives développées sur ces sujets.

Plusieurs études ont montré les avantages d'une mesure de rugosité par diffusion lumineuse [47]–[49] et principalement pour la caractérisation des réseaux périodiques [50], [51]. En effet dans le contexte de la microélectronique, il faut principalement noter qu'elles sont :

- réalisées en champ lointain donc à distance ;
- non destructives et non invasives ;
- non ponctuelles comme des mesures de microscopie.

Il est également primordial qu'elles soient répétables. La métrologie par diffusion présente donc tous les atouts pour être industrialisable et permettre des mesures directement sur les lignes de fabrication. A ces critères, on pourra ajouter des coûts d'équipements peu élevés comparés à d'autres techniques.

## **4.1 Diffusion lumineuse et principe de l'accès aux paramètres de rugosité de réseaux périodiques**

Dans les composants réels, les états de surface et les matériaux ne sont pas parfaits. Ces hétérogénéités sont responsables de la diffusion de la lumière en dehors des directions spéculaires transmise et réfléchi. Les techniques de métrologie par diffusion lumineuse consistent à mesurer et à interpréter les signaux de diffusion afin d'extraire par problème inverse les paramètres des hétérogénéités. Pour ce faire, le laboratoire a développé des modèles électromagnétiques afin de décrire les mécanismes de diffusion. Ces modèles peuvent être approchés ([52]–[57]), ou rigoureux [28]



Dans le cas des surfaces peu rugueuses ou de volumes peu hétérogènes, il existe un lien direct entre l'intensité diffusée et la topologie des surfaces illuminées. Il est important de noter que l'échelle de caractérisation des hétérogénéités dépend des conditions expérimentales (ce point est détaillé au paragraphe 4.3.1) [58], [59].

Les mesures de diffusion sont réalisées grâce à un diffusomètre angulairement résolu, développé par l'Institut Fresnel [52], [54], [60]–[62]. Ce dispositif mesure la lumière diffusée par un échantillon en fonction de l'angle de diffusion ; l'illumination étant assurée par diverses sources laser de différentes longueurs d'onde. Ce montage est présenté dans la Figure 4-2. Plusieurs sources laser sont disponibles et le montage possède un grand nombre de degrés de liberté permettant au détecteur de mesurer la diffusion sur toute la sphère autour d'un échantillon.

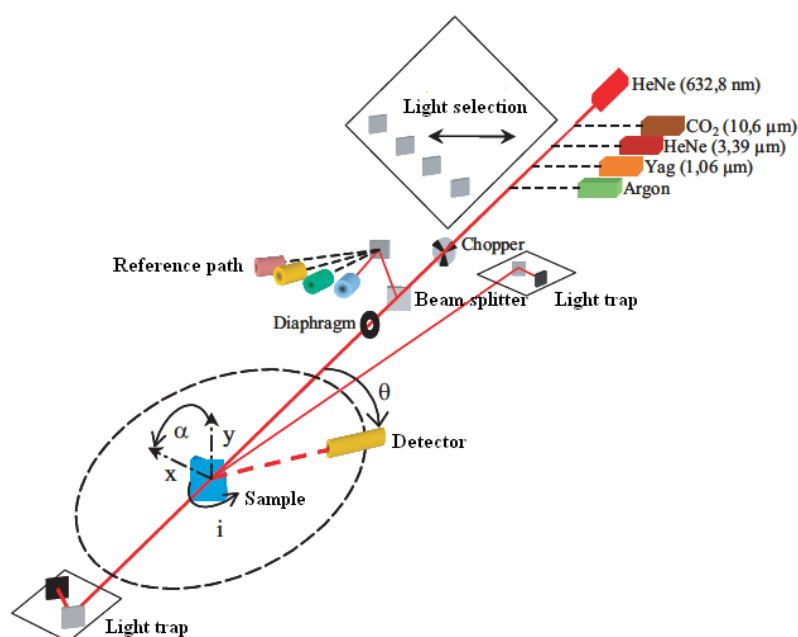


Figure 4-2 : Diffusomètre angulairement résolu.

La configuration classique pour des mesures de diffusion utilise un faisceau incident de 2 mm de diamètre, de longueur d'onde 632,8 nm. La mesure est réalisée dans le plan d'incidence (en fonction de l'angle  $\theta$ ), l'angle  $\phi$  est donc nul.

Néanmoins, pour cette étude, les dimensions latérales des échantillons fournis par STMicroelectronics imposent de focaliser le faisceau afin qu'il illumine une zone inférieure à 40  $\mu\text{m}$  de large. Pour ce faire, des optiques de filtration et de focalisation sont nécessaires. Le banc de mesure cité précédemment ne permettant pas un ajout facile de ces équipements, un nouveau banc de mesure a été développé dans le cadre de cette thèse de doctorat. Celui-ci est conçu globalement sur le même principe, mais il permet facilement d'insérer des composants pour la focalisation du faisceau et de choisir très précisément la zone à mesurer sur l'échantillon. Un porte échantillon spécifique a été développé. En contrepartie, le bras est mobile uniquement dans le plan d'incidence et nous n'avons conservé que les moteurs utiles à ces mesures.

Ce montage dupliqué a été entièrement automatisé et est placé dans un espace contigu au montage de référence, dans la même salle blanche.

Pour rappel, la source utilisée est un laser He-Ne de longueur d'onde  $\lambda = 632,8 \text{ nm}$ .

Pour les mesures de diffusion de surface, nous nous intéresserons uniquement à un seul plan de mesure, le plan d'incidence (et non plus la sphère entière de diffusion). Le détecteur se déplacera uniquement selon l'angle  $\theta$  avec un angle d'incidence fixé à  $0^\circ$ . Concernant les limitations de cette configuration, la focalisation entraîne une augmentation de l'encombrement. La conséquence est une limitation de la plage angulaire accessible uniquement à un quart de l'espace réfléchi. Les petits angles de diffusion ne sont pas accessibles. La Figure 4-3 présente la dynamique de mesure accessible via ce nouveau diffusomètre entre un échantillon lambertien diélectrique qui diffuse théoriquement 98% de la lumière incidente et la mesure sans échantillon (mesure à vide). On obtient une dynamique de mesure de l'ordre de cinq décades.

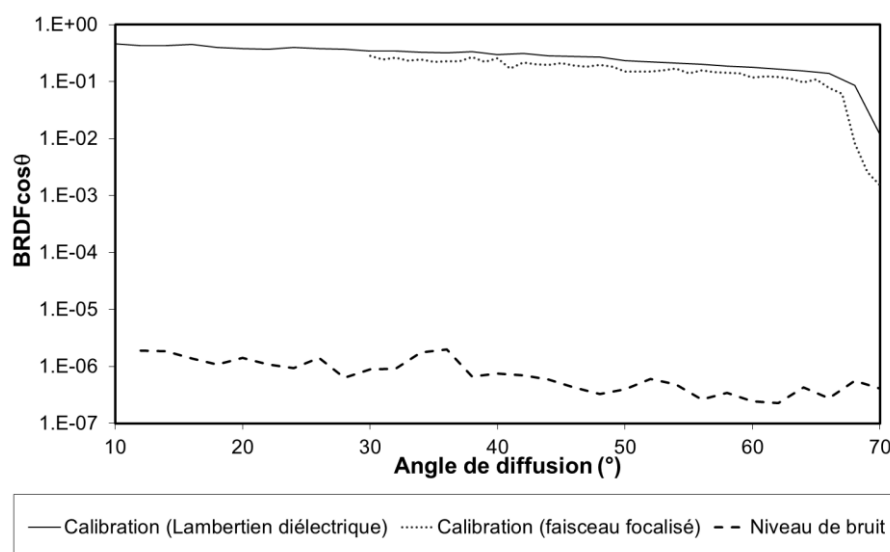


Figure 4-3 : Dynamique de mesure entre un échantillon lambertien totalement diffusant et le niveau de bruit (mesure sans échantillon) dans le cas d'un faisceau incident parallèle et focalisé.

Afin d'illustrer le potentiel de cette technique, une mesure de diffusion est réalisée dans un premier temps sur un échantillon commercial, constitué d'un réseau de diffraction triangulaire de 600 lignes/mm. La mesure d'intensité diffusée est présentée sur la Figure 4-4. Nous observons sur cette courbe de mesure plusieurs composantes : les ordres de diffraction sont caractéristiques de la périodicité du réseau, et il existe également de la lumière diffusée entre ces ordres de diffraction, qui est liée aux inhomogénéités.

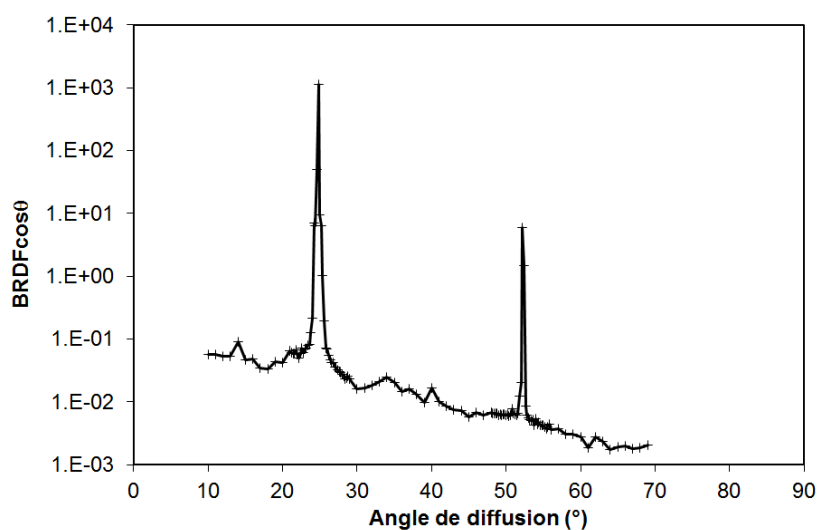
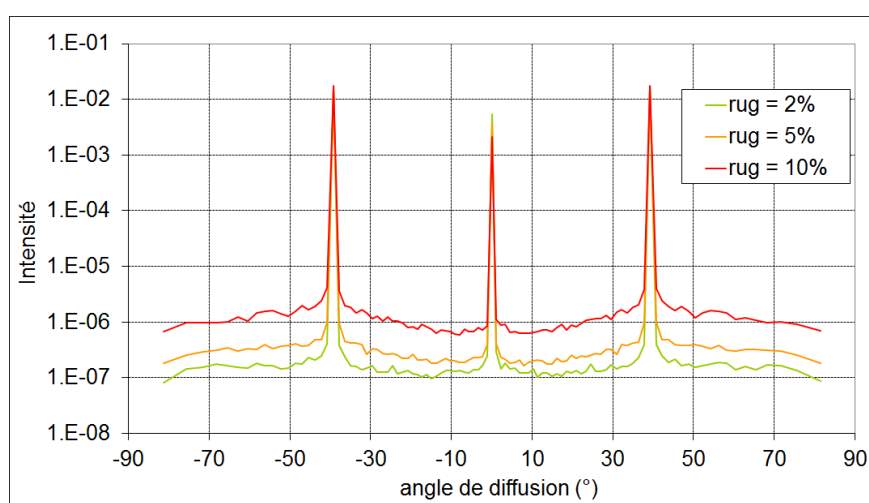


Figure 4-4 : Intensité diffusée par un réseau rugueux blasé de période 600 lignes/mm.

La grande dynamique de l'instrument de mesure permet d'accéder à la fois aux ordres de diffraction, grâce à l'introduction de filtres pour ne pas saturer le détecteur, et à la diffusion, puisque 6 décades sont nécessaires pour ce faire.

D'après les travaux réalisés dans la thèse précédente [28], un lien existe entre la rugosité et l'intensité diffusée par un réseau de diffraction. Les intensités calculées à partir de modélisations réalisées par Laurent Arnaud sur des réseaux périodiques de même amplitude mais de rugosités différentes sont présentées sur la Figure 4-5. On note que plus la rugosité augmente, plus le niveau moyen de diffusion entre les ordres de diffraction augmente. Mais à ce stade, aucune extraction de la rugosité n'est possible. En effet, les modélisations rigoureuses ne permettent pas de trouver un lien direct entre l'intensité diffusée et les propriétés statistiques des rugosités.



**Figure 4-5 : Impact de la rugosité sur l'amplitude de la diffusion lumineuse, la rugosité est exprimée en pourcentage de l'amplitude du réseau [63].**

L'objectif de notre étude est de poursuivre ces investigations, et de mettre en place une technique qui permettra réellement d'extraire les propriétés de la rugosité présente sur des réseaux des composants microélectroniques à partir de mesures de diffusion lumineuse. Pour cela, nous devons travailler sur les modèles électromagnétiques utilisés pour interpréter les résultats expérimentaux. Les

modèles rigoureux ne permettent pas une extraction simple des paramètres de rugosité. Les modèles approchés le peuvent, mais ne permettent pas de décrire les ordres de diffraction des réseaux. Nous avons donc choisi de combiner ces approches, de manière à proposer une méthode simple et rapide d'inversion.

Dans un premier temps, la méthode rigoureuse de résolution que nous utilisons dans l'équipe sera présentée, il s'agit de la méthode différentielle. Elle a été validée dans le cas des composants de la microélectronique et fonctionne en trois dimensions. Mais les temps de calcul ne sont pas, selon les cas, en phase avec une industrialisation. Ensuite, un modèle approché sera présenté, basé sur une approximation au premier ordre, hypothèse valable uniquement dans le cas où les dimensions du réseau (amplitude, rugosité) sont négligeables devant la longueur d'onde.

Cette contrainte sur les dimensions est un frein à l'utilisation de cette technique en microélectronique où les structures étudiées seront de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde. Une méthode hybride sera donc développée.

## 4.2 Méthodes de résolution des équations de Maxwell

La métrologie par diffusion lumineuse nécessite au préalable de savoir prédire l'intensité diffusée par un échantillon à partir de la connaissance de ses hétérogénéités (de surface ou de volume). Ce problème passe par la résolution des équations de Maxwell dans un milieu complexe. Cette résolution n'a a priori pas de solution analytique simple et seule une résolution numérique est possible. Plusieurs algorithmes existent (méthode intégrale, modale ou par éléments finis...) [64]; nous présentons ici plus en détail la méthode différentielle[28], qui est celle qui a été développée dans le travail de doctorat précédent, et que nous utilisons régulièrement dans l'équipe. Cependant dans certains cas, des approximations permettent d'accéder à une résolution simplifiée et d'obtenir une solution analytique (approximation de Kirchhoff, méthode des petites perturbations ou Small

Perturbations Method, méthode de champ moyen...)[65]. On s'intéressera ici plus particulièrement à l'approximation de Born ou au premier ordre.

#### 4.2.1 Méthode différentielle

Depuis une trentaine d'années, des travaux ont été réalisés au sein de l'Institut Fresnel sur la propagation de la lumière dans les milieux aléatoires [66]. La modélisation électromagnétique permet d'obtenir le champ diffusé ou diffracté par une surface ou un volume périodique ou aléatoire. La méthode présentée ici s'appuie sur la résolution des équations de Maxwell grâce à la détermination d'un système d'équations différentielles reliant les différents champs (électrique et magnétique), c'est pourquoi elle est appelée « méthode différentielle ». Cette technique a été développée dans un premier temps, pour déterminer le champ diffracté par des réseaux [66] et étendue par la suite aux surfaces rugueuses [67]. Le nouveau code a été développé [28] pour prendre en compte les diffusions de surface et de volume [68], [69]. La résolution s'appuie sur l'algorithme des matrices S [70]

Ce code de calcul de résolution numérique des équations de Maxwell par méthode différentielle a été développé lors d'un précédent travail de thèse [28]. Le principal défaut de cette méthode est la durée des calculs pour des structures à deux ou trois dimensions. Bien entendu, ceci est lié à la puissance de calcul disponible et peut par conséquent être réduit. Cette méthode rigoureuse permet de valider numériquement d'autres modèles approchés, tel que les modèles basés sur l'approximation du premier ordre, moins consommatrices en temps de calcul.

##### 4.2.1.1 Définition du problème

L'objectif est de déterminer les amplitudes des champs électrique et magnétique afin d'obtenir l'intensité diffractée en réflexion et en transmission. On considère dans la suite de la démonstration que les profils considérés présentent une direction d'invariance et que le plan d'incidence est perpendiculaire à celle-ci.

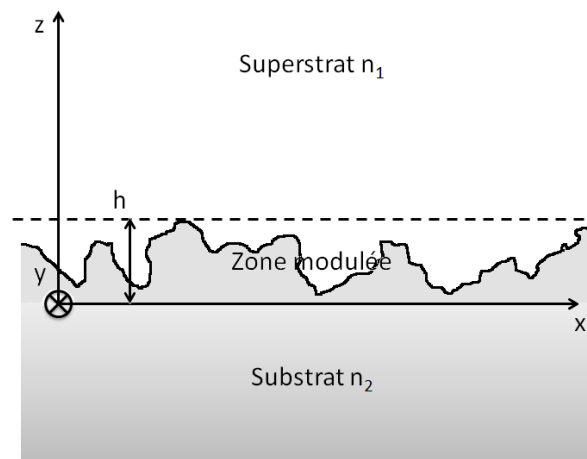


Figure 4-6 : Définition du repère.

#### 4.2.1.2 Système d'équations en polarisation transverse électrique (TE)

On considère tout d'abord le cas d'une polarisation TE. Dans le repère défini (cf. Figure 4-6), le champ électrique se réduit à sa composante selon  $\vec{e}_y$ , parallèle à la direction d'invariance du profil. Le champ  $\vec{E}$  peut-être décrit selon l'équation de Helmholtz :

$$\Delta \vec{E} + k^2 \vec{E} = \vec{0} \text{ avec } k = \frac{2\pi n(x, z)}{\lambda} \quad 4.1$$

soit en coordonnées cartésiennes :

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \vec{E}_y(x, z) = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \vec{E}_y(x, z) - k^2(x, z) \vec{E}_y(x, z) \quad 4.2$$

Il est donc nécessaire pour connaître le champ  $\vec{E}$  de résoudre cette équation différentielle du second ordre à deux dimensions. Pour cela, une transformation de Fourier suivant x est appliquée :

$$\tilde{A}(\sigma) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{A}(x) e^{-i\sigma x} dx \quad 4.3$$

Cette transformation fait apparaître un produit de convolution noté « \* » et défini comme :

$$(f * g)(\sigma) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\sigma - \sigma') g(\sigma') d\sigma' \quad 4.4$$

Afin d'alléger l'écriture, on omettra le signe des vecteurs dans l'espace de Fourier, ainsi par exemple  $\tilde{\bar{A}} = \tilde{A}$ . L'équation (4.1) devient alors :

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{E}_y(\sigma, z) = \sigma^2 \tilde{E}_y(\sigma, z) - \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{k}^2(\sigma - \sigma', z) \tilde{E}_y(\sigma', z) d\sigma' \quad 4.5$$

La résolution numérique impose la discrétisation de l'espace de Fourier, telle que  $\sigma_n = \sigma_0 + n\Delta\sigma$ , avec  $\sigma_0 = k \sin(\theta_i)$  et  $\theta_i$  l'angle d'incidence. Elle permet d'écrire l'équation (4.5) en un système infini d'équations. En considérant que les contributions de certaines fréquences spatiales sont négligeables au-delà d'un certain seuil  $\sigma_N$ , on peut tronquer le système<sup>2</sup> et ne considérer qu'un nombre fini d'équations.

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{E}_y(n, z) = \sigma_n^2 \tilde{E}_y(n, z) - \sum_{m=-N}^{+N} \tilde{k}^2(n - m, z) \tilde{E}_y(m, z) \Delta\sigma \quad 4.6$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \tilde{E}_y(n, z) = \sum_{m=-N}^{+N} [\sigma_n^2 \delta_{n,m} - \tilde{k}^2(n - m, z) \Delta\sigma] \tilde{E}_y(m, z) \quad 4.7$$

---

<sup>2</sup> Le nombre N suffisant pour la troncation doit permettre de couvrir l'ensemble des ondes propagatives et une partie des ondes évanescentes. Ainsi, la conservation de l'énergie sera convenable.



avec  $\delta_{n,m}$  le symbole de Kronecker (qui vaut 1 si  $n=m$  et 0 sinon).

Afin de simplifier l'écriture, on pose  $E_n = \Delta\sigma \tilde{E}_y(n, z)$  et  $k_n^2 = \Delta\sigma \tilde{k}^2(n, z)$ .

L'équation (4.7) devient alors :

$$\frac{\partial^2 E_n}{\partial z^2} = \sum_{m=-N}^{+N} [\sigma_n^2 \delta_{n,m} - k_{n-m}^2] E_m \quad 4.8$$

#### 4.2.1.3 Système d'équations en polarisation transverse magnétique (TM)

On se place maintenant dans le cas d'une onde incidente polarisée en TM. Alors, le champ magnétique se réduit à sa composante selon  $\vec{e}_y$ , parallèle à la direction d'invariance du profil. Le champ  $\vec{H}$  peut-être décrit selon l'équation de Helmholtz :

$$\Delta \vec{H} + \omega^2 \mu \varepsilon \vec{H} = i\omega \overrightarrow{\text{grad}} \varepsilon \wedge \vec{E} \quad 4.9$$

Sachant que le champ magnétique se réduit à sa composante  $H_y$ , l'équation précédente devient :

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} + \omega^2 \mu \varepsilon H_y = i\omega \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} E_x - i\omega \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} E_z \quad 4.10$$

Or, à partir des équations de Maxwell, en considérant que la surface est invariante selon  $\vec{e}_y$ , on peut écrire des relations entre les composantes du champ électrique et du champ magnétique :

$$\begin{cases} \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = i\omega\mu H_y \\ -\frac{\partial H_y}{\partial z} = -i\omega\varepsilon E_x \\ \frac{\partial H_y}{\partial x} = -i\omega\varepsilon E_z \end{cases} \quad 4.11$$

En remplaçant les composantes du champ électrique défini par l'équation (4.11), l'équation (4.10) devient :

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} - \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial z} \frac{\partial H_y}{\partial z} = -\frac{\partial^2 H_y}{\partial x^2} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \frac{\partial H_y}{\partial x} - \omega^2 \mu \varepsilon H_y \quad 4.12$$

Après factorisation, on peut écrire que :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial H_y}{\partial x} \right) - \omega^2 \mu H_y \quad 4.13$$

Sachant que  $E_x = \frac{1}{i\omega\varepsilon} \frac{\partial H_y}{\partial z}$  et si l'on pose  $k^2 = \omega^2 \mu \varepsilon$ ,

$$\begin{cases} \frac{1}{i\omega\mu} \frac{\partial E_x}{\partial z} = H_y - \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{k^2} \frac{\partial H_y}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial H_y}{\partial z} = \frac{1}{i\omega\mu} k^2 E_x \end{cases} \quad 4.14$$

Comme dans le cas d'une polarisation TE, le but de ces calculs est d'écrire un système d'équations différentielles selon la variable z. Pour cela, une transformation de Fourier selon x est effectuée :

$$\begin{cases} \frac{1}{i\omega\mu} \frac{\partial \tilde{E}_x}{\partial z}(\sigma, z) = \tilde{H}_y(\sigma, z) - \sigma \left( \left( \frac{\tilde{1}}{k^2} \right) * \tilde{\sigma} \tilde{H}_y \right) (\sigma, z) \\ \frac{\partial \tilde{H}_y}{\partial z} = \frac{1}{i\omega\mu} \left( \tilde{k}^2 * \tilde{E}_x \right) (\sigma, z) \end{cases} \quad 4.15$$

Pour simplifier l'écriture, on pose  $\tilde{H}'_y = \omega\mu\tilde{H}_y$ . En explicitant les produits de convolution sous forme d'intégrales, l'équation précédente devient alors :

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{E}_x}{\partial z}(\sigma, z) = i\sigma \int_{-\infty}^{+\infty} \sigma' \left( \frac{\tilde{1}}{k^2} \right) (\sigma - \sigma', z) \tilde{H}'_y(\sigma', z) d\sigma' + i\tilde{H}'_y(\sigma, z) \\ \frac{\partial \tilde{H}'_y}{\partial z}(\sigma, z) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{k}^2(\sigma - \sigma', z) \tilde{E}_x(\sigma', z) d\sigma' \end{cases} \quad 4.16$$

En discrétisant suivant  $\sigma$  et en posant :  $E_n = \Delta\sigma\tilde{E}_x(\sigma_n, z)$ ,  $H'_n = \Delta\sigma\tilde{H}'_y(\sigma_n, z)$ ,

$k^2_{n-m} = \Delta\sigma k^2_x(\sigma_n - \sigma_m, z)$ ,  $\left( \frac{\tilde{1}}{k^2} \right)_{n,m} = \Delta\sigma \left( \frac{\tilde{1}}{k^2} \right) (\sigma_n - \sigma_m, z)$  avec  $\sigma_n = \sigma_0 + n\Delta\sigma$ , on

peut écrire :

$$\begin{cases} \frac{\partial E_n}{\partial z} = iH'_n + i\sigma_n \sum_{m=-N}^{+N} \sigma_m \left( \frac{\tilde{1}}{k^2} \right)_{n-m} H'_m \\ \frac{\partial H'_n}{\partial z} = -i \sum_{m=-N}^{+N} \sigma_m (k^2)_{n-m} E_m \end{cases} \quad 4.17$$

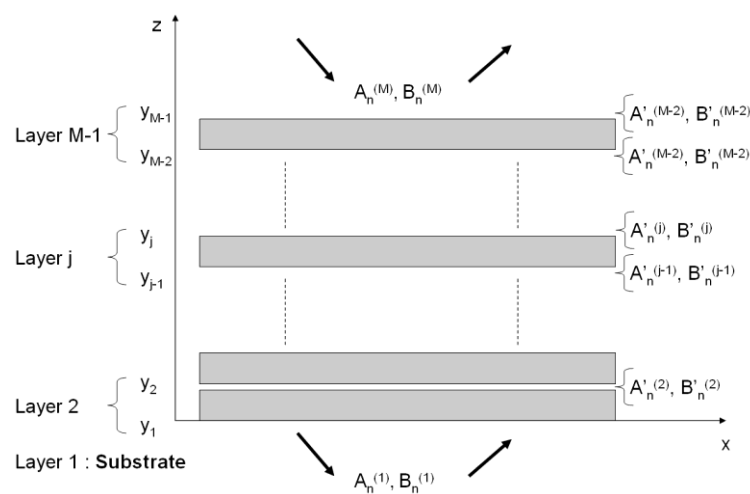
Le système (4.17) permet de décrire le champ en polarisation TM.

#### 4.2.1.4 Algorithme de propagation des matrices S

En s'appuyant sur la résolution développée par Nevière et Popov [66], utilisant l'algorithme de propagation des matrices S, on peut déterminer l'amplitude des champs électriques et magnétiques. L'algorithme des matrices S repose sur une

représentation matricielle liant les amplitudes des champs  $\vec{E}$  et  $\vec{H}$  de chaque côté d'une interface. Cette écriture est très pratique dans le cas d'empilements multicouches car il donne un système d'équations pour chaque interface.

Dans cette partie uniquement, on note  $A_n^{(i)}$  et  $B_n^{(i)}$  respectivement la valeur de la composante rétrograde et propagative du champ électrique en fonction de  $n$  pour la couche  $i$ . La Figure 4-7 décrit les notations des différentes composantes pour la résolution de l'algorithme des matrices  $S$ .



**Figure 4-7 : Empilement quelconque pour la définition des variables pour l'algorithme des matrices  $S$  [66].**

Dans le cadre d'une résolution numérique, la zone modulée est divisée en tranches d'égales hauteurs. Ceci permettra le calcul du champ diffracté de proche en proche et en utilisant les notations de la Figure 4-7. On peut écrire pour la dernière couche  $M$  :

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ B_n^{(M)} e^{i\beta_n^{(M)} z_{M-1}} \\ \vdots \\ \hline \vdots \\ A_n^{(1)} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11}^{(M-1)} & S_{12}^{(M-1)} \\ S_{21}^{(M-1)} & S_{22}^{(M-1)} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ B_n^{(1)} \\ \vdots \\ \hline \vdots \\ A_n^{(M)} e^{-i\beta_n^{(M)} z_{M-1}} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad 4.18$$

On considère qu'il n'y a aucune source du côté du substrat, soit  $B_n^{(1)} = 0 \quad \forall n$ , alors l'équation (4.18) peut s'écrire comme le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} B_n^{(M)} e^{i\beta_n^{(M)} z_{M-1}} = \sum_{m=-N}^{+N} S_{12,n,m}^{(M-1)} A_m^{(M)} e^{-i\beta_m^{(M)} z_{M-1}} \\ A_n^{(1)} = \sum_{m=-N}^{+N} S_{22,n,m}^{(M-1)} A_m^{(M)} e^{-i\beta_m^{(M)} z_{M-1}} \end{cases} \quad 4.19$$

avec  $S_{ij,n,m}^{(M-1)}$  l'élément de la ligne n et de la colonne m de la matrice  $S_{ij}^{(M-1)}$ .

L'onde incidente est considérée comme une onde plane d'amplitude 1, donc  $A_m^{(M)} = \delta_{m,0}$ , où  $\delta_{m,0}$  est le symbole de Kronecker. L'équation (4.19) se simplifie alors :

$$\begin{cases} B_n^{(M)} = S_{12,n,0}^{(M-1)} e^{-i(\beta_n^{(M)} \beta_0^{(M)}) z_{M-1}} \\ A_n^{(1)} = S_{22,n,0}^{(M-1)} e^{-i\beta_0^{(M)} z_{M-1}} \end{cases} \quad 4.20$$

Connaissant les matrices  $S_{12}$  et  $S_{22}$ , il est facile de déterminer le champ diffracté et transmis par l'ensemble de la structure. Néanmoins, pour les besoins de notre étude, nous avons également besoin des calculs des champs intermédiaires.

A partir de cette première itération, et pour n'importe quelle tranche "q", on peut écrire :

$$\begin{pmatrix} \vdots \\ B_n^{(q)} e^{i\beta_n^{(q)} z_{q-1}} \\ \vdots \\ \hline \vdots \\ A_n^{(1)} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11}^{(q-1)} & S_{12}^{(q-1)} \\ S_{21}^{(q-1)} & S_{22}^{(q-1)} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ B_n^{(1)} \\ \vdots \\ \hline \vdots \\ A_n^{(q)} e^{-i\beta_n^{(q)} z_{q-1}} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad 4.21$$

Pour simplifier les notations, on définit :

$$F_q^+ = \begin{pmatrix} \vdots \\ B_n^{(q)} e^{i\beta_n^{(q)} z_{q-1}} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad F_q^- = \begin{pmatrix} \vdots \\ A_n^{(q)} e^{i\beta_n^{(q)} z_{q-1}} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad 4.22$$

Ce qui permet d'écrire :

$$\begin{cases} F_q^+ = S_{12}^{(q-1)} F_q^- \\ F_1^- = S_{22}^{(q-1)} F_q^- \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} F_q^- = (S_{22}^{(q-1)})^{-1} F_1^- \\ F_q^+ = S_{12}^{(q-1)} F_q^- \end{cases} \quad 4.23$$

Pour déterminer le vecteur  $F_q^-$ , correspondant aux composantes rétrogrades de l'onde diffusée, il est nécessaire d'inverser la matrice  $S_{22}$ .

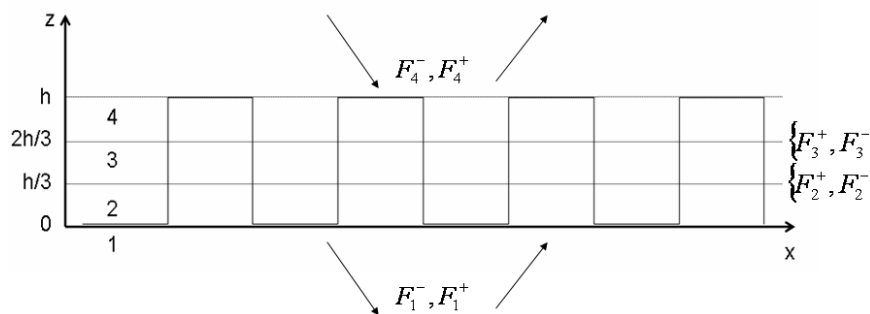


Figure 4-8 : Exemple de découpage d'un réseau de hauteur h en trois tranches d'égale hauteur.

Pour illustrer le calcul à réaliser, on considère le cas présenté sur la Figure 4-8. Un réseau carré de hauteur  $h$  est divisé en 3 tranches identiques de hauteur  $h/3$  notées de 2 à 4, la première étant constituée du substrat et la dernière du superstrat. Dans cet exemple, une première itération permet de calculer à partir de l'onde incidente  $F_4^-$  la valeur de l'onde transmise  $F_1^-$ .

$$\begin{cases} F_4^+ = S_{12}^{(3)} F_4^- \\ F_1^- = S_{22}^{(3)} F_4^- \end{cases} \quad 4.24$$

On obtient ainsi les amplitudes des champs pour chaque couche<sup>3</sup> :

$$\begin{cases} F_3^- = (S_{22}^{(2)})^{-1} F_1^- \\ F_3^+ = S_{12}^{(2)} F_3^- \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} F_2^- = (S_{22}^{(1)})^{-1} F_1^- \\ F_2^+ = S_{12}^{(1)} F_2^- \end{cases} \quad 4.25$$

Pour illustrer les résultats obtenus avec ce modèle, nous allons présenter l'intensité diffusée ou diffractée dans le demi-espace réfléchi pour différents types de surfaces. On considère, tout d'abord, une surface rugueuse aléatoire dont on fait varier l'amplitude de la rugosité. Un exemple de profil est présenté dans la Figure 4-9.

---

<sup>3</sup>Nevière et Popov [66] proposent une autre méthode de calcul pour éviter l'inversion de la matrice  $S_{12}$ , basé sur le calcul des matrices  $Z$  définie par les équations (4.25) :

$$\begin{cases} (S_{22}^{(q)})^{-1} = Z^{(q)} (S_{22}^{(q+1)})^{-1} \\ (S_{22}^{(q)})^{-1} = Z^{(q)} Z^{(q+1)} \dots Z^{(M-2)} (S_{22}^{(M-1)})^{-1} \end{cases}$$

En introduisant le résultat de l'équation précédente dans l'équation (4.25), on peut écrire que :

$$F_q^- = Z^{(q)} Z^{(q+1)} \dots Z^{(M-2)} (S_{22}^{(M-1)})^{-1} F_1^-$$

Or  $F_M^- = (S_{22}^{(M-1)})^{-1} F_1^-$ , l'expression précédente devient :

$$F_q^- = Z^{(q)} Z^{(q+1)} \dots Z^{(M-2)} F_M^-$$

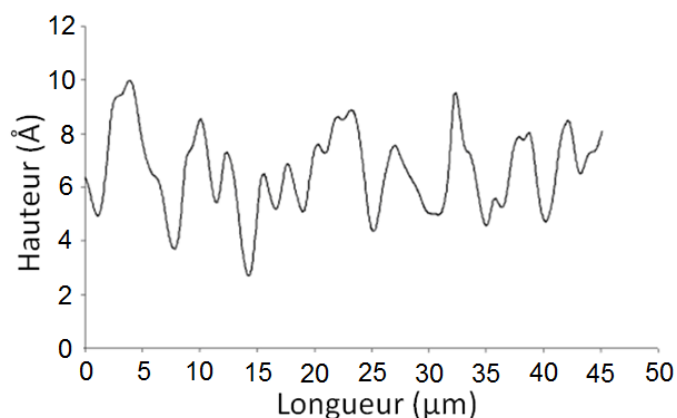


Figure 4-9 : Profil rugueux aléatoire.

Deux profils sont générés à partir de cette surface aléatoire pour simuler deux profils rugueux d'amplitudes 1 Å et 10 Å, d'un matériau homogène d'indice de réfraction 1,5. Après résolution par la méthode différentielle, l'intensité calculée à partir de ces deux surfaces rugueuses est présentée par la Figure 4-10. La rugosité a bien un impact direct sur l'intensité diffusée.

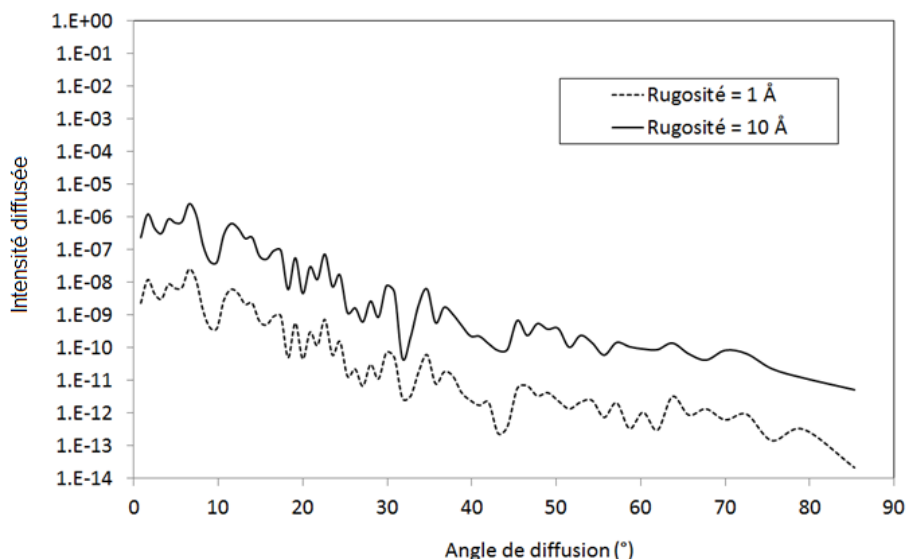


Figure 4-10 : Intensité diffusée par deux surfaces de rugosité de l'ordre de 1 Å et 10 Å. Polarisation TE et longueur d'onde égale à 632,8 nm.



Ces profils rugueux sont additionnés à un profil sinusoïdal parfait d'amplitude 100 Å et de période 900 lignes/mm. Un exemple de profil est donné dans la Figure 4-11.

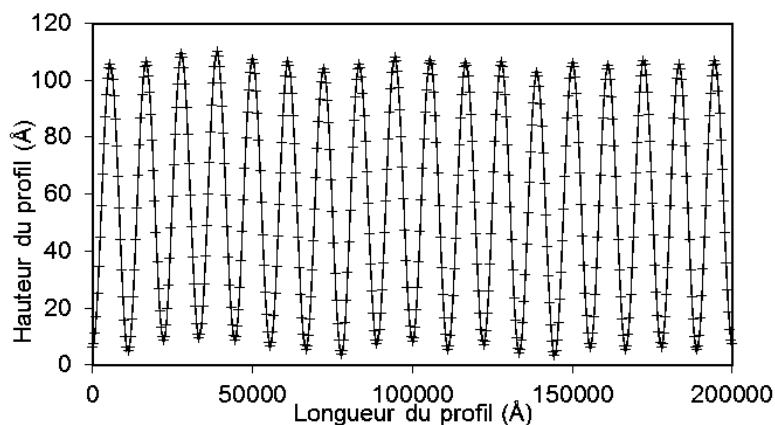


Figure 4-11 : Exemple de profil sinusoïdal d'amplitude 100Å et de rugosité 10 Å.

L'intensité diffusée est déterminée également à partir de ces profils. On retrouve le même comportement de diffusion que pour les profils rugueux seuls, en dehors de l'ordre de diffraction.

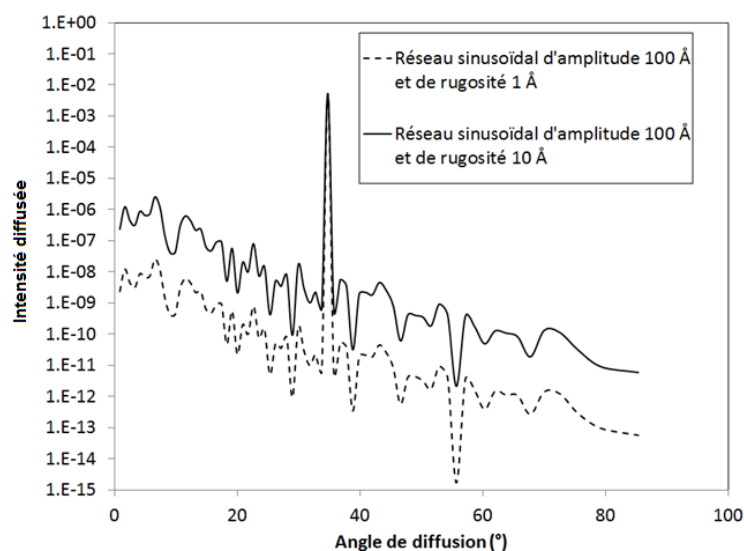


Figure 4-12 : Intensité diffusée par deux réseaux de forme sinusoïdales, de période 900 lignes/mm, d'amplitude 100 Å, et de rugosité de l'ordre de 1 Å et 10 Å. Polarisation TE et longueur d'onde égale à 632,8 nm.

Ces calculs mettent en avant la relation entre la rugosité et la diffusion lumineuse non seulement pour les profils rugueux mais également pour les réseaux rugueux. Ces premiers résultats se basent sur des géométries très petites, avec une amplitude de réseau et une rugosité très faibles devant la longueur d'onde. Ceci afin de pouvoir envisager par substitution et avec l'avantage d'extraire des résultats dans des temps très courts, une méthode de calcul approchée basée sur l'approximation du premier ordre que nous présentons dans les paragraphes suivants.

#### 4.2.2 Approximation du premier ordre

Nous étudions ici encore le cas de surfaces rugueuses. Dans cette démarche approchée, nous considérerons systématiquement que la surface rugueuse est une perturbation d'une surface idéale. La surface idéale génère un champ réfléchi ou transmis appelé champ « idéal ». L'effet de la rugosité se traduit par une perturbation de ce champ idéal. Cette configuration est rencontrée lorsque les dimensions géométriques des surfaces considérées (hauteur, rugosité, etc...) sont négligeables devant la longueur d'onde et que la moyenne quadratique des pentes est faible. Dans les faits, l'approximation du premier ordre permet de résoudre les équations de Maxwell en négligeant les termes d'ordre supérieur à un, et présentera l'avantage, comme nous le verrons, de faire apparaître une correspondance directe entre le champ diffusé et le profil de la surface. Cette simplification présente des avantages évidents pour les applications en métrologie.

Dans un premier temps, le cas d'une surface plane rugueuse est présenté. Puis, progressivement, nous nous intéresserons au cas de l'intensité diffusée par des réseaux rugueux d'amplitudes croissantes, ce qui nous le verrons introduira la nécessité d'une méthode hybride. Cette méthode est nouvelle, et basée sur l'utilisation des deux techniques de calculs citées précédemment. Elle permet de prendre en compte le profil périodique parfait par la méthode différentielle tandis que la rugosité est considérée comme une perturbation de ce profil et peut donc

être analysée via une méthode basée sur l'approximation du premier ordre. Dans ces conditions, la méthode différentielle utilisée sur une partie du profil est couteuse en temps de calcul mais peut permettre de générer une base de données qu'il n'est pas nécessaire de reproduire systématiquement, tandis que le développement de la perturbation par méthode hybride permet de fournir une méthode de calcul rapide qui donnera accès aux extractions de paramètres à partir des mesures de manière quasi instantanée.

#### 4.2.2.1 Définition de la normale

Soit un profil  $z = h(x, y)$  et  $M$  un point de coordonnées  $(x, y, z)$  appartenant à ce profil.

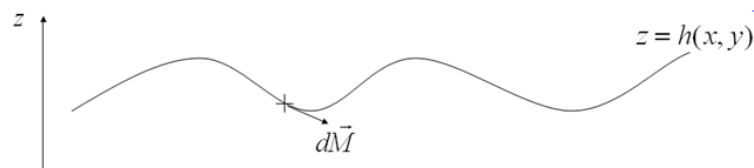


Figure 4-13 : Définition du vecteur  $\overrightarrow{dM}$  pour un profil quelconque  $h$ .

Dans l'espace direct  $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ , considérons une faible variation selon l'axe  $z$  telle que :

$$dz = dh = \frac{\partial h}{\partial x} dx + \frac{\partial h}{\partial y} dy \quad 4.26$$

Par ailleurs, la valeur du gradient du profil peut s'écrire :

$$\overrightarrow{gradh} = \frac{\partial h}{\partial x} \vec{x} + \frac{\partial h}{\partial y} \vec{y} \quad 4.27$$

On note  $\overrightarrow{dM}$  un déplacement élémentaire sur le profil :

$$\overrightarrow{dM} = dx.\vec{x} + dy.\vec{y} + dz.\vec{z} \quad 4.28$$

Par conséquent,  $\overrightarrow{gradh}.\overrightarrow{dM} = \frac{\partial h}{\partial x} dx + \frac{\partial h}{\partial y} dy$

Et donc,

$$\overrightarrow{dM}.\left(\vec{z} - \overrightarrow{gradh}\right) = 0 \quad 4.29$$

$\overrightarrow{dM}$  et  $\left(\vec{z} - \overrightarrow{gradh}\right)$  sont donc perpendiculaires et  $\left(\vec{z} - \overrightarrow{gradh}\right)$  est perpendiculaire à la surface, définissant ainsi sa normale.

Le vecteur unitaire définissant la normale à la surface est donc :

$$\vec{n} = \frac{\vec{z} - \overrightarrow{gradh}}{\sqrt{1 + \overrightarrow{grad}^2 h}} \quad 4.30$$

L'approximation au premier ordre consiste à faire l'hypothèse que les surfaces sont faiblement rugueuses avec des pentes de faible inclinaison, soit  $\overrightarrow{grad}^2 h \ll 1$ . Ceci permet de simplifier l'expression de la normale :

$$\vec{n} \approx \vec{z} - \overrightarrow{gradh} \quad 4.31$$

#### 4.2.2.2 Ecriture du champ diffusé

Le champ total diffusé par le réseau rugueux peut être mis sous la forme :

$$\vec{E} = \vec{E}^0 + \vec{E}^d \quad 4.32$$

avec  $\vec{E}^0$  le champ dit « idéal » réfléchi ou transmis par une surface dite parfaite, c'est-à-dire un dioptre plan, et  $\vec{E}^d$  le champ diffusé par la surface considérée.

#### 4.2.2.3 Relation de continuité du champ

On note  $\vec{\delta E}(h)$  la différence du champ  $\vec{E}$  avant et après l'interface. Le développement limité en série de Taylor nous donne au premier ordre sur l'interface :

$$\vec{\delta E}(h) = \vec{\delta E}(0) + \frac{\partial \vec{\delta E}(0)}{\partial z} (h - 0) \quad 4.33$$

La définition du champ total donnée dans l'équation (4.32) est intégrée à l'équation précédente et en notant  $\frac{\partial}{\partial z} = \partial_z$  :

$$\vec{\delta E}(h) = \vec{\delta E}^0(0) + \vec{\delta E}^d(0) + \partial_z \vec{\delta E}(0).h \quad 4.34$$

D'une part, la continuité de la composante tangentielle du champ électrique permet d'écrire :

$$\vec{n} \wedge \vec{\delta E} = \vec{0} \quad 4.35$$

L'expression de la normale (4.30) et du saut du champ électrique à l'interface (4.34) permettent d'obtenir l'expression suivante :

$$\vec{n} \wedge \vec{\delta E} = \left( \vec{z} - \overrightarrow{gradh} \right) \wedge \left( \vec{\delta E}^0(0) + \vec{\delta E}^d(0) + \partial_z \vec{\delta E}(0).h \right) \quad 4.36$$

Cette dernière équation devient après développement et simplification :

$$\vec{n} \wedge \vec{\delta E} = \vec{z} \wedge \vec{\delta E}^d(0) + \vec{z} \wedge \partial_z \left( \vec{\delta E}^0(0) \right).h - \overrightarrow{gradh} \wedge \vec{\delta E}^0(0) \quad 4.37$$

car :

- $\left( \vec{z} - \overrightarrow{gradh} \right) \wedge \vec{\delta E}^0(0) = \vec{0}$  par continuité de la composante tangentielle du champ idéal à l'interface ;
- $\overrightarrow{gradh} \wedge \partial_z \left( \vec{\delta E}^0(0) \right).h$  est un terme du second ordre qui peut être négligé devant les termes du premier ordre ;
- $\overrightarrow{gradh} \wedge \left( \vec{\delta E}^0(0) + \vec{\delta E}^d(0) \right) \approx \overrightarrow{gradh} \wedge \vec{\delta E}^0(0)$

En combinant les deux équations (4.34) et (4.37), on obtient :

$$\vec{z} \wedge \overrightarrow{\delta E^d}(0) = -\vec{z} \wedge \partial_z \left( \overrightarrow{\delta E^0}(0) \right) h + \overrightarrow{grad} h \wedge \overrightarrow{\delta E^0}(0) \quad 4.38$$

L'équation précédente exprime directement le saut de la composante tangentielle du champ diffusé, par rapport à une surface de normale  $z$ , c'est à dire par rapport à une interface parfaite. Elle montre ainsi que la présence de rugosité revient à considérer une surface parfaite sur laquelle est présent un courant que l'on note  $\vec{M}$  dépendant du champ idéal, et dont l'expression est donnée par le second membre de l'équation (4.38).

Un calcul analogue peut être mené avec  $\vec{H}$  et permet d'écrire une équation équivalente en définissant un courant  $\vec{J}$ . La relation de continuité de la composante tangentielle du champ magnétique et le saut du champ magnétique à l'interface permettent d'écrire :

$$\vec{n} \wedge \overrightarrow{\delta H} = \vec{0} = \vec{z} - \overrightarrow{grad} h \wedge \left( \overrightarrow{\delta H^0}(0) + \overrightarrow{\delta H^d}(0) + \partial_z \overrightarrow{\delta H}(0).h \right) \quad 4.39$$

Comme pour le champ électrique, cette équation permet d'écrire que la présence de la rugosité est équivalente à la présence d'un courant  $\vec{J}$  sur une surface parfaite, et d'en déterminer l'expression :

$$\vec{J} = -\vec{z} \wedge \partial_z \overrightarrow{\delta H^0}(0).h \quad 4.40$$

Les équations (4.39) et (4.40) montrent que le problème de la diffusion se ramène au problème d'un dioptré plan chargé. Les valeurs des courants  $\vec{M}$  et  $\vec{J}$  sont fonctions du profil de la surface et du champ réfléchi ou transmis par la surface idéale.

#### 4.2.2.4 Expression de l'intensité diffusée

Les champs électrique et magnétique diffusés, pour chaque milieu de part et d'autre du dioptre (les exposants + et – désignant respectivement les ondes propagatives et rétrogrades), peuvent être décomposés en paquets d'ondes planes :

$$\begin{cases} \vec{E}_1^-(\vec{\rho}) = \int_{\vec{\sigma}} \vec{A}_1^-(\vec{\sigma}) e^{(j\vec{\sigma} \cdot \vec{r} - \alpha z)} d\vec{\sigma} \\ \vec{E}_2^+(\vec{\rho}) = \int_{\vec{\sigma}} \vec{A}_2^+(\vec{\sigma}) e^{(j\vec{\sigma} \cdot \vec{r} + \alpha z)} d\vec{\sigma} \end{cases} \quad 4.41$$

$$\begin{cases} \vec{H}_1^-(\vec{\rho}) = \int_{\vec{\sigma}} \vec{B}_1^-(\vec{\sigma}) e^{(j\vec{\sigma} \cdot \vec{r} - \alpha z)} d\vec{\sigma} \\ \vec{H}_2^+(\vec{\rho}) = \int_{\vec{\sigma}} \vec{B}_2^+(\vec{\sigma}) e^{(j\vec{\sigma} \cdot \vec{r} + \alpha z)} d\vec{\sigma} \end{cases} \quad 4.42$$

La résolution passe par l'utilisation des relations de passage à l'interface définies précédemment :

$$\begin{cases} \vec{z} \wedge \delta \vec{E}^d = \vec{M} \\ \vec{z} \wedge \delta \vec{H}^d = \vec{J} \end{cases} \quad 4.43$$

La résolution de ce système d'équations, via une transformée de Fourier spatiale, permet d'aboutir [71] à une expression liant les amplitudes progressives et rétrogrades  $\vec{A}^+$  et  $\vec{A}^-$  du champ électrique et  $\vec{B}^+$  et  $\vec{B}^-$  du champ magnétique diffusés et les courants  $\vec{M}$  et  $\vec{J}$ , en l'absence de champ incident (compris dans les courants) :

$$\begin{cases} \vec{A}_1^- = \frac{1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \left( \tilde{n}_2 \times \vec{z} \wedge \tilde{\vec{M}} - \tilde{\vec{J}} \right) \\ \vec{A}_2^+ = \frac{1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \left( -\tilde{n}_1 \times \vec{z} \wedge \tilde{\vec{M}} - \tilde{\vec{J}} \right) \end{cases} \quad 4.44$$

$$\begin{cases} \vec{B}_1^- = \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \left( \tilde{n}_2 \vec{M} + \vec{z} \wedge \vec{J} \right) \\ \vec{B}_2^+ = \frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} \left( \tilde{n}_1 \vec{M} - \vec{z} \wedge \vec{J} \right) \end{cases} \quad 4.45$$

avec  $\tilde{n}_i$  l'indice effectif du milieu  $i$  défini comme :

$$\tilde{n}_i = \frac{1}{\eta_0 \mu_r} \begin{cases} n_i \alpha / k & \text{en polarisation TE} \\ n_i k / \alpha & \text{en polarisation TM} \end{cases} \quad 4.46$$

avec :

- dans le cas des ondes propagatives  $\alpha = k \cos \theta$  ;
- $\eta_0$  l'impédance du vide définie par  $\eta_0 = \mu_0 c$ ,  $\mu_0 = 4\pi 10^{-7} \text{ kg.m.A}^{-2}.\text{s}^{-2}$  étant la perméabilité du vide et  $c$  la vitesse de lumière dans le vide ;
- $\mu_r$  la permittivité relative qui dépend du matériau ;
- $k$  le vecteur d'onde.

Une fois les amplitudes des champs connues, il est possible de calculer l'expression de l'intensité diffusée définie par le flux du vecteur de Poynting normé au flux incident :

$$I(\theta, \phi) = \frac{1}{\Phi_0} \frac{d\Phi(\theta, \phi)}{d\theta} \quad 4.47$$

On obtient ainsi l'intensité diffusée qui peut se mettre sous la forme simplifiée [53], [55], [56] :

$$I(\theta, \phi) = C(\theta, \phi) \gamma(\theta, \phi) \quad 4.48$$

où :

- $C(\theta, \phi)$  est un coefficient optique dit « idéal » ne dépendant que des indices de réfraction des milieux, des conditions d'illumination et de détection. Ce paramètre peut être calculé au préalable selon la configuration de la mesure et la connaissance des milieux ;



- $\gamma(\theta, \phi)$  correspond au spectre de rugosité de la surface et s'écrit :

$$\gamma(\vec{\sigma}) = \frac{4\pi^2}{S} \left| \tilde{h}(\vec{\sigma}) \right|^2 \quad 4.49$$

avec :

- $\vec{\sigma}$  la pulsation spatiale :

$$\vec{\sigma} = \frac{2\pi n}{\lambda} \sin\theta (\cos\phi, \sin\phi) \quad 4.50$$

où :

- n est l'indice de réfraction,
- S est l'aire de la surface mesurée,
- si h est le profil de la surface,  $\tilde{h}$  désigne la transformée de Fourier spatiale de h.

- $\left| \tilde{h}(\vec{\sigma}) \right|^2$  correspond à la densité spectrale de puissance ou Power Spectral Density (PSD) en anglais.

#### 4.2.2.5 Détermination de la rugosité à partir d'une mesure de diffusion

##### 4.2.2.5.1 Cas général

La rugosité est définie pour toute cette étude comme la racine carrée de la moyenne quadratique de la hauteur du profil. Ceci est possible en considérant que la surface est centrée en altitude. Ainsi, la rugosité correspond également à l'intégration du spectre de rugosité :

$$R_q^2 = \frac{1}{S} \int_S h^2(\vec{r}) d\vec{r} = \int_{\vec{\sigma}} \gamma(\vec{\sigma}) d\vec{\sigma} \quad 4.51$$

avec  $d\vec{r} = dx dy$  et  $d\vec{\sigma} = d\sigma_x d\sigma_y$ .

Dans le cas de mesures de diffusion, les variables spatiales sont liées aux angles de diffusion par la relation (4.50). L'expression précédente devient [58]:

$$R_q^2 = \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 \int_{\substack{0 \leq \theta \leq \pi/2 \\ 0 \leq \phi \leq 2\pi}} \gamma(\theta, \phi) \sin\theta \cos\theta d\theta d\phi \quad 4.52$$

Pour simplifier l'expression du spectre de rugosité une moyenne polaire sur l'angle  $\phi$  est réalisée :

$$\bar{\gamma} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \gamma(\theta, \phi) d\phi \quad 4.53$$

Ce type de moyenne permet de simplifier le problème bidimensionnel et de ne conserver qu'une seule dimension. Concrètement, les mesures effectuées dans l'ensemble de l'espace réfléchi constitué par une demi-sphère délimitée par la surface de l'échantillon pourront se résumer à une seule mesure, dans le plan d'incidence.

L'expression de la rugosité devient alors :

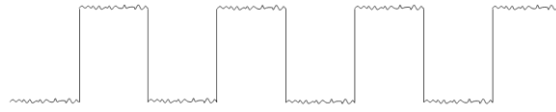
$$R_q^2 = 2\pi \int_{\sigma_{\min}}^{\sigma_{\max}} \bar{\gamma}(\sigma) \sigma d\sigma \quad 4.54$$

#### 4.2.2.5.2 Cas d'un réseau rugueux

Nous nous intéressons maintenant à des profils correspondant à ceux des composants de la microélectronique, objets de cette étude. La surface étudiée, un réseau périodique rugueux, peut se décomposer en deux contributions. Une illustration est proposée par la Figure 4-14 avec un réseau en forme de créneaux. La partie périodique est appelée « P(x) » et la partie rugueuse notée « R(x) » :

$$h(x) = z = R(x) + P(x) \quad 4.55$$





$h(x)$

**Figure 4-14 : Décomposition géométrique d'un réseau rugueux en une partie périodique P et une partie rugueuse R.**

Pour que l'approximation au premier ordre soit valable,  $h(x)$  et a fortiori les deux composantes  $P(x)$  et  $R(x)$ , doivent être des perturbations du dioptre plan et présenter des hauteurs de profils, ainsi que des pentes, faibles. On introduit cette nouvelle expression dans l'équation (4.48) :

$$I(\theta, \phi) = C(\theta, \phi) \cdot \frac{4\pi^2}{S} \left| \tilde{R}(\vec{\sigma}) + \tilde{P}(\vec{\sigma}) \right|^2 \quad 4.56$$

Le développement du module carré permet d'écrire :

$$I(\theta, \phi) = I_p(\theta, \phi) + I_r(\theta, \phi) + 2 \operatorname{Re} \left[ C(\theta, \phi) \cdot \frac{4\pi^2}{S} \tilde{R}(\vec{\sigma}) \tilde{P}^*(\vec{\sigma}) \right] \quad 4.57$$

avec :

- l'intensité diffractée «  $I_p$  » par la partie périodique du profil :

$$I_p(\theta, \phi) = C(\theta, \phi) \cdot \gamma_p \quad 4.58$$

- l'intensité diffusée par la rugosité :

$$I_r(\theta, \phi) = C(\theta, \phi) \cdot \gamma_R \quad 4.59$$

- et un terme croisé :

$$2 \operatorname{Re} \left[ C(\theta, \phi) \cdot \frac{4\pi^2}{S} \tilde{P}(\vec{\sigma}) \tilde{R}^*(\vec{\sigma}) \right] \quad 4.60$$

La transformée de Fourier d'un profil périodique parfait est constituée d'un peigne de Dirac, correspondant aux ordres de diffraction. On en déduit que  $\tilde{P}(\vec{\sigma})$ , et par conséquent  $I_p$ , et le terme croisé, sont nuls pour toutes les pulsations spatiales sauf celles correspondant aux ordres de diffraction. La rugosité, généralement constituée par une fonction aléatoire, a une transformée de Fourier non nulle

quelque que soit la pulsation spatiale. Il est donc possible de séparer les deux contributions en analysant l'intensité angulaire. Les ordres de diffraction donneront une information sur la périodicité alors que les autres angles de diffusion donneront une information sur la rugosité.

### 4.2.3 Généralisation à une surface idéale quelconque

Dans le cas de mesures de réseaux rugueux pour la microélectronique, la rugosité est toujours faible devant la longueur d'onde, toutefois les structures périodiques peuvent avoir des hauteurs plus grandes. Le modèle précédent ne peut donc plus s'appliquer. Une généralisation est proposée ici : nous allons supposer que la surface idéale est ici la structure périodique. Ainsi, le réseau rugueux peut être vu comme un réseau parfait  $P(x)$  sur lequel est ajoutée une perturbation qui correspond à la rugosité  $R(x)$ .

Le champ total diffusé par le réseau rugueux s'écrit, comme précédemment, comme la somme des champs idéal et diffusé :

$$\vec{E} = \vec{E}^0 + \vec{E}^d \quad 4.61$$

mais ici :

- $\vec{E}^0$ , le champ idéal, est le champ diffracté par le réseau parfait  $P(x)$  ;
- $\vec{E}^d$  est le champ diffusé par la rugosité  $R(x)$ .

#### 4.2.3.1.1 Relation de continuité du champ

On note  $\delta\vec{E}(h)$  la différence du champ  $\vec{E}$  avant et après l'interface. Le développement limité en série de Taylor nous donne au premier ordre sur l'interface :

$$\delta\vec{E}(h) = \delta\vec{E}(P) + \frac{\partial\delta\vec{E}(P)}{\partial z}(h - P) \quad 4.62$$

Soit en intégrant la définition du champ total diffusé donné par l'équation (4.61)

$$\vec{\delta E}(h) = \vec{\delta E}^0(P) + \vec{\delta E}^d(P) + \partial_z \vec{\delta E}(P).R \quad 4.63$$

D'une part, la relation de continuité de la composante tangentielle du champ électrique à l'interface permet d'écrire :

$$\vec{n} \wedge \vec{\delta E} = \vec{0} \quad 4.64$$

D'autre part, en remplaçant par leurs expressions  $\vec{\delta E}(h)$  et la normale (4.30) on obtient une seconde relation :

$$\vec{n} \wedge \vec{\delta E} = \frac{\vec{z} - \overrightarrow{\text{grad}h}}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}h}^2}} \wedge \left( \vec{\delta E}^0(P) + \vec{\delta E}^d(P) + \partial_z \vec{\delta E}(P).R \right) \quad 4.65$$

Pour alléger les expressions, on note  $N = \sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}h}^2}$ . Le développement de l'expression (4.65) conduit à :

$$\begin{aligned} \vec{n} \wedge \vec{\delta E} &= \frac{\vec{z}}{N} \wedge \vec{\delta E}^0(P) + \frac{\vec{z}}{N} \wedge \vec{\delta E}^d(P) \\ &+ \frac{\vec{z}}{N} \wedge \partial_z \left( \vec{\delta E}(P) \right) R - \frac{\overrightarrow{\text{grad}h}}{N} \wedge \vec{\delta E}^0(P) \\ &- \frac{\overrightarrow{\text{grad}h}}{N} \wedge \vec{\delta E}^d(P) - \frac{\overrightarrow{\text{grad}h}}{N} \wedge \partial_z \left( \vec{\delta E}(P) \right) R \end{aligned} \quad 4.66$$

où  $h = R + P$  et donc  $\overrightarrow{\text{grad}h} = \overrightarrow{\text{grad}R} + \overrightarrow{\text{grad}P}$ . L'équation se simplifie et peut se mettre sous la forme :

$$\vec{n} \wedge \vec{\delta E} = \frac{\vec{z}}{N} \wedge \vec{\delta E}^d(P) + \frac{\vec{z}}{N} \wedge \partial_z \left( \vec{\delta E}(P) \right) R - \frac{\overrightarrow{\text{grad}R}}{N} \wedge \vec{\delta E}^0(P) - \frac{\overrightarrow{\text{grad}P}}{N} \wedge \vec{\delta E}^d(P) \quad 4.67$$

En effet :

- $\frac{\vec{z} - \overrightarrow{\text{grad}P}}{N} \wedge \overrightarrow{\delta E^0}(P) = \vec{0}$  car  $\vec{z} - \overrightarrow{\text{grad}P}$  est colinéaire à  $\vec{n}_{\text{réseaux parfait}}$  et la continuité de la composante tangentielle du champ électrique impose que  $\vec{n} \wedge \overrightarrow{\delta E} = \vec{0}$  ;
- $\frac{\overrightarrow{\text{grad}h}}{N} \wedge \partial_z (\overrightarrow{\delta E}(P)) \cdot R$  est un terme du second ordre qui peut être négligé devant les termes du premier ordre ;
- $\frac{\overrightarrow{\text{grad}R}}{N} \wedge (\overrightarrow{\delta E^0}(P) + \overrightarrow{\delta E^d}(P)) \approx \frac{\overrightarrow{\text{grad}R}}{N} \wedge \overrightarrow{\delta E^0}(P)$ .

Il reste donc :

$$\begin{aligned} \vec{n} \wedge \overrightarrow{\delta E} = & \frac{\vec{z} - \overrightarrow{\text{grad}P}}{N} \wedge \overrightarrow{\delta E^d}(P) + \frac{\vec{z}}{N} \wedge \partial_z (\overrightarrow{\delta E^0}(P)) \cdot R \\ & - \frac{\overrightarrow{\text{grad}R}}{N} \wedge \overrightarrow{\delta E^0}(P) \end{aligned} \quad 4.68$$

Les profils P et h correspondant à des dimensions réelles, N et  $\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}$  sont en général non nuls ; sauf dans le cas où le profil périodique P présente une discontinuité, comme par exemple un réseau en forme de créneaux (dans ce cas, localement  $\overrightarrow{\text{grad}P} = \infty$ ). En excluant ce cas, on multiplie par N et on divise par  $\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}$  la relation (4.68) afin de faire apparaître une expression qui peut se rapprocher de la théorie du premier ordre précédemment présentée. On obtient ainsi :

$$\begin{aligned} \vec{n}_{\text{réseaux parfait}} \wedge \overrightarrow{\delta E^d}(P) = & \frac{\overrightarrow{\text{grad}R}}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \wedge \overrightarrow{\delta E^0}(P) - \frac{\vec{z}}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \wedge \partial_z (\overrightarrow{\delta E^0}(P)) \cdot R \end{aligned} \quad 4.69$$

avec  $\vec{n}_{\text{réseaux parfait}} = \frac{\vec{z} - \overrightarrow{\text{grad}P}}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}}$

Comme pour l'équation (4.38), la présence de la rugosité revient à considérer une interface parfaite avec un courant  $\vec{M}$  dont l'expression est donnée par l'équation ci-dessus.

Un calcul analogue peut être mené avec  $\vec{H}$ . En partant de la relation de continuité et en développant le calcul comme précédemment, on écrit que :

$$\vec{n} \wedge \delta \vec{H} = \vec{0} = \frac{\vec{z} - \vec{grad}h}{N} \wedge \left( \delta \vec{H}^0(P) + \delta \vec{H}^d(P) + \partial_z \delta \vec{H}(P).R \right) \quad 4.70$$

Cette équation permet de montrer que la présence de la rugosité est équivalente à la présence d'un courant  $\vec{J}$  dont l'expression est donnée par l'équation :

$$\vec{J} = \frac{\vec{grad}R}{\sqrt{1 + \vec{grad}^2 P}} \wedge \delta \vec{H}^0(P) - \frac{\vec{z}}{\sqrt{1 + \vec{grad}^2 P}} \wedge \partial_z \delta \vec{H}^0(P).R \quad 4.71$$

La présence d'une rugosité à la surface du réseau parfait peut être traitée comme si l'interface était chargée par un des courants  $\vec{M}$  et  $\vec{J}$  définis par les équations (4.70) et (4.71)

On obtient ainsi un système d'équations permettant le calcul de l'intensité diffusée à partir de la connaissance du champ diffracté par le réseau et des profils périodiques et rugueux. Par rapport aux équations (4.39) et (4.40) obtenues via l'approximation « classique » du premier ordre, nous faisons dorénavant apparaître explicitement les composantes périodiques et rugueuses de façon dissociées. Il est également important de noter que les calculs des différences de champ  $\delta E$  et  $\delta H$  ne se font plus par rapport à un plan d'altitude 0, mais le long du profil périodique.

#### 4.2.3.2 Expression des amplitudes diffusées

Afin de comprendre les différences introduites par la généralisation au cas de réseaux périodiques rugueux, le passage des courants de surface aux amplitudes va être développé dans cette partie.

A partir des équations (4.70) et (4.71), les produits vectoriels sont développés. Pour simplifier l'écriture, on note par la suite  $\delta E_i^0(P) = \delta E_i$  et  $\delta H_i^0(P) = \delta H_i$  :

$$\vec{M} = \frac{1}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \begin{pmatrix} \frac{\partial R}{\partial y} \delta E_z - \frac{\partial R}{\partial z} \delta E_y + R \cdot \partial_z (\delta E_y) \\ -\frac{\partial R}{\partial x} \delta E_z + \frac{\partial R}{\partial z} \delta E_x - R \cdot \partial_z (\delta E_x) \\ \frac{\partial R}{\partial x} \delta E_y - \frac{\partial R}{\partial y} \delta E_x \end{pmatrix} \quad 4.72$$

$$\vec{J} = \frac{1}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \begin{pmatrix} \frac{\partial R}{\partial y} \delta H_z - \frac{\partial R}{\partial z} \delta H_y + R \cdot \partial_z (\delta H_y) \\ -\frac{\partial R}{\partial x} \delta H_z + \frac{\partial R}{\partial z} \delta H_x - R \cdot \partial_z (\delta H_x) \\ \frac{\partial R}{\partial x} \delta H_y - \frac{\partial R}{\partial y} \delta H_x \end{pmatrix} \quad 4.73$$

##### 4.2.3.2.1 Cas d'une polarisation transverse électrique (TE)

On considère, tout d'abord, que le faisceau incident est polarisé en TE. Le champ électrique se réduit alors à sa composante selon l'axe  $\vec{e}_y$ . Dans le repère  $(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$  les composantes des champs s'écrivent :

$$\overrightarrow{\delta E^0(P)} = \begin{pmatrix} 0 \\ \delta E_y^0(P) \\ 0 \end{pmatrix} \text{ et } \overrightarrow{\delta H^0(P)} = \begin{pmatrix} \delta H_x^0(P) \\ 0 \\ \delta H_z^0(P) \end{pmatrix} \quad 4.74$$

Dans ce cas, les expressions des courants se simplifient et on peut écrire :



$$\begin{aligned}
 z \wedge \tilde{\mathbf{M}} &= TF \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \right) * \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\mathbf{R}} * (\partial_z (\delta \tilde{\mathbf{E}}_y)) \\ 0 \end{pmatrix} \\
 \tilde{\mathbf{J}} &= TF \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \right) * \begin{pmatrix} 0 \\ -\tilde{\mathbf{R}} * (\partial_z (\delta \tilde{\mathbf{H}}_x)) - i \sigma \tilde{\mathbf{R}} * \delta \tilde{\mathbf{H}}_z \\ 0 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{4.75}$$

Les expressions de l'amplitude des champs dans les demi-espaces réfléchis  $A_1^{d-}$  et transmis  $A_2^{d+}$  par une interface chargée par des courants  $\overrightarrow{\mathbf{M}}$  et  $\overrightarrow{\mathbf{J}}$  s'écrivent :

$$A_1^{d-} = \frac{1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} (\tilde{n}_2 z \wedge \tilde{\mathbf{M}} - \tilde{\mathbf{J}}) \tag{4.76}$$

$$A_2^{d+} = \frac{1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} (-\tilde{n}_1 z \wedge \tilde{\mathbf{M}} - \tilde{\mathbf{J}}) \tag{4.77}$$

Soit en intégrant les expressions des courants :

$$A_1^{d-} = \frac{1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} TF \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \right) * \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\mathbf{R}} * (\tilde{n}_2 \partial_z (\delta \tilde{\mathbf{E}}_y) + \partial_z (\delta \tilde{\mathbf{H}}_x)) + i \sigma \tilde{\mathbf{R}} * \delta \tilde{\mathbf{H}}_z \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.78}$$

$$A_2^{d+} = \frac{1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} TF \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \right) * \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{\mathbf{R}} * (-\tilde{n}_1 \partial_z (\delta \tilde{\mathbf{E}}_y) + \partial_z (\delta \tilde{\mathbf{H}}_x)) + i \sigma \tilde{\mathbf{R}} * \delta \tilde{\mathbf{H}}_z \\ 0 \end{pmatrix} \tag{4.79}$$

#### 4.2.3.2.2 Cas d'une polarisation transverse magnétique (TM)

En polarisation TM, dans le repère orthonormé (défini sur la Figure 4-6), le champ magnétique est orienté selon l'axe  $\vec{e}_y$ .

$$\overrightarrow{\delta H^0}(P) = \begin{pmatrix} 0 \\ \delta H_y^0(P) \\ 0 \end{pmatrix} \text{ et } \overrightarrow{\delta E^0}(P) = \begin{pmatrix} \delta E_x^0(P) \\ 0 \\ \delta E_z^0(P) \end{pmatrix} \tag{4.80}$$

Comme en polarisation TE, le calcul de l'amplitude diffusée nécessite d'abord de déterminer les sources de courant fictifs  $\vec{M}$  et  $\vec{J}$  :

$$\begin{aligned}\tilde{M} &= TF \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \right) * \begin{pmatrix} 0 \\ -i\sigma\tilde{R} * \delta\tilde{E}_z - \tilde{R} * \partial_z (\delta\tilde{E}_x) \\ 0 \end{pmatrix} \\ z \wedge \tilde{J} &= TF \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \right) * \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{R} * \partial_z (\delta\tilde{H}_y) \\ 0 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad 4.81$$

Les expressions de l'amplitude des champs magnétiques dans les demi-espaces réfléchis  $B_1^{d-}$  et transmis  $B_2^{d+}$  par une interface chargée par des courants  $\vec{M}$  et  $\vec{J}$  s'écrivent

$$\begin{aligned}B_1^{d-} &= \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} (\tilde{n}_2 \tilde{M} + z \wedge \tilde{J}) \\ B_2^{d+} &= \frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} (\tilde{n}_1 \tilde{M} - z \wedge \tilde{J})\end{aligned}\quad 4.82$$

En développant les équations (4.82) à partir des équations (4.81) :

$$B_1^{d-} = \frac{\tilde{n}_1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} TF \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \right) * \begin{pmatrix} 0 \\ -\tilde{n}_2 i\sigma\tilde{R} * \delta\tilde{E}_z + \tilde{R} * (-\tilde{n}_2 \partial_z (\delta\tilde{E}_x) + \partial_z (\delta\tilde{H}_y)) \\ 0 \end{pmatrix}\quad 4.83$$

$$B_2^{d+} = \frac{\tilde{n}_2}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} TF \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \right) * \begin{pmatrix} 0 \\ -\tilde{n}_1 i\sigma\tilde{R} * \delta\tilde{E}_z + \tilde{R} * (-\tilde{n}_1 \partial_z (\delta\tilde{E}_x) - \partial_z (\delta\tilde{H}_y)) \\ 0 \end{pmatrix}\quad 4.84$$

Pour obtenir le champ diffusé par le réseau rugueux, il est donc nécessaire de connaître  $\delta\tilde{E}_y, \delta\tilde{H}_x, \delta\tilde{H}_z$  en polarisation TE et  $\delta\tilde{E}_x, \delta\tilde{E}_z, \delta\tilde{H}_y$  en polarisation TM autour du réseau parfait. Pour ce faire, les cartographies des champs seront déterminées via

la méthode différentielle. L'algorithme des matrices S a un effet l'avantage de permettre le calcul des cartographies des champs.

#### 4.2.3.3 Calcul de l'intensité

Une fois que les composantes des champs idéaux sont connues, il est tout à fait possible de calculer les amplitudes des champs diffusés à partir de la détermination des courants  $\vec{M}$  et  $\vec{J}$ . Pour rappel, l'équation (4.47) définissant l'intensité à partir du vecteur de Poynting est :

$$I(\theta) = \frac{1}{\Phi_0} \frac{d\Phi(\theta)}{d\theta}$$

Or, la densité spectrale du flux s'écrit :

$$\frac{d\Phi(\theta)}{d\theta} = \frac{k^2}{2\omega\mu} |\tilde{A}(\sigma)|^2 \cos^2(\theta) \quad 4.85$$

En considérant l'onde incidente plane et d'amplitude égale à 1, le flux incident discrétisé et borné aux ondes propagatives est donné par :

$$\Phi_0 = \frac{1}{2\omega\mu} k_i \cos(\theta_i) \quad 4.86$$

L'intensité devient donc :

$$I(\theta) = \frac{k^2 \cos^2 \theta}{k_i \cos \theta_i} |\tilde{A}(\sigma)|^2 \quad 4.87$$

A titre d'exemple, on peut écrire l'expression de l'intensité diffusée dans le demi-espace réfléchi, dans le cas d'une polarisation TE, en remplaçant dans

l'équation précédente l'amplitude du champ rétrodiffusé définie par l'équation (4.71) :

$$I(\theta) = \frac{k^2 \cos^2 \theta}{k_i \cos \theta_i} \times \left| \frac{1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} TF \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \text{grad}^2 P}} \right) * \left( \tilde{R} * \left( \tilde{n}_2 \partial_z (\delta \tilde{E}_y) + \partial_z (\delta \tilde{H}_x) \right) + i \sigma \tilde{R} * \delta \tilde{H}_z \right) \right|^2 \quad 4.88$$

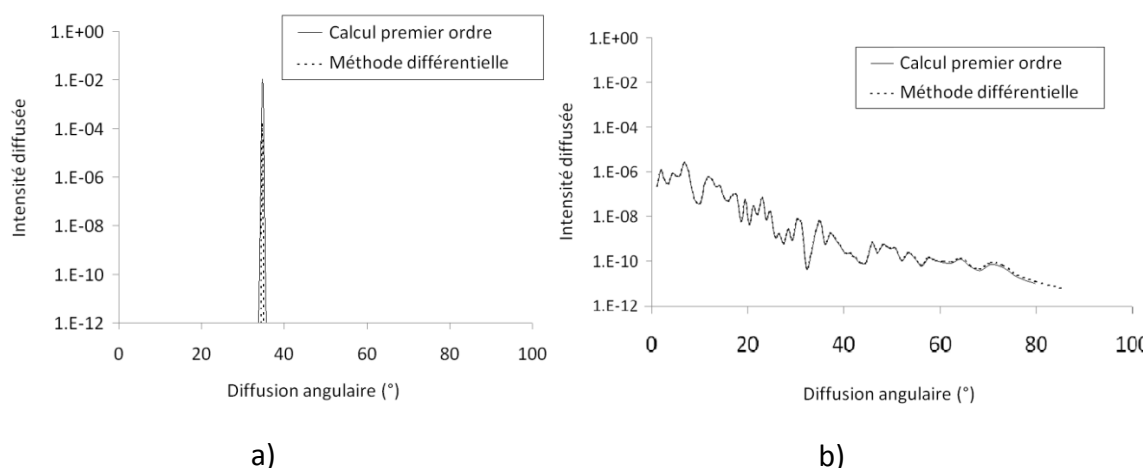
#### 4.2.3.4 Résultats numériques sur des réseaux rugueux

##### 4.2.3.4.1 Cas d'une hauteur faible devant la longueur d'onde

Comme nous l'avons vu dans la partie théorique (paragraphe 4.2.2.5.2), il est possible de dissocier, dans le cadre de l'approximation du premier ordre, la partie périodique du réseau de la rugosité. Ceci est valable uniquement hors des ordres de diffraction (équations (4.58) et (4.59)).

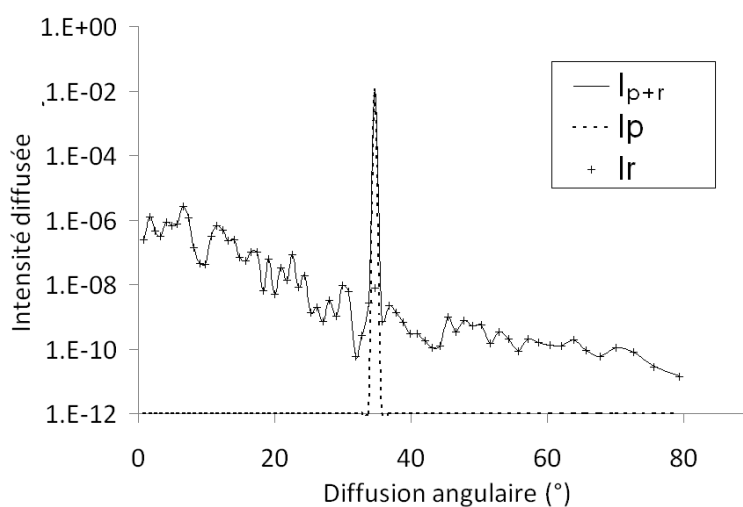
A partir d'un réseau en créneaux périodique parfait, c'est à dire sans rugosité et d'un profil purement rugueux présenté précédemment sur la Figure 4-9, l'intensité est calculée grâce à la méthode différentielle pour l'un et l'approximation du premier ordre pour l'autre.

Dans un premier temps, les calculs de l'intensité pour chacun de ces deux types de surface, séparément, sont réalisés. La Figure 4-15 présente les intensités calculées. Concernant le profil périodique, l'intensité calculée est bien constituée uniquement d'un ordre de diffraction, l'intensité diffusée en dehors de cet ordre de diffraction est nulle. A l'inverse, l'intensité du profil rugueux est directement liée au spectre de rugosité, sans aucun ordre de diffraction. Pour une surface rugueuse dont les dimensions respectent le premier ordre, les deux méthodes de calcul donnent logiquement les mêmes résultats.



**Figure 4-15 : Intensité calculée pour une surface a) parfaitement périodique de période 900 lignes/mm, b) parfaitement rugueuse.**

Dans un second temps, la somme des deux profils permet de définir un réseau rugueux. La Figure 4-16 présente les résultats obtenus avec ce profil. Les intensités précédentes sont également ajoutées sur cette figure. En dehors des ordres de diffraction contenant l'impact de la périodicité et du terme croisé, l'intensité diffusée par un réseau rugueux correspond parfaitement à la somme des deux contributions calculées séparément [72]–[74].



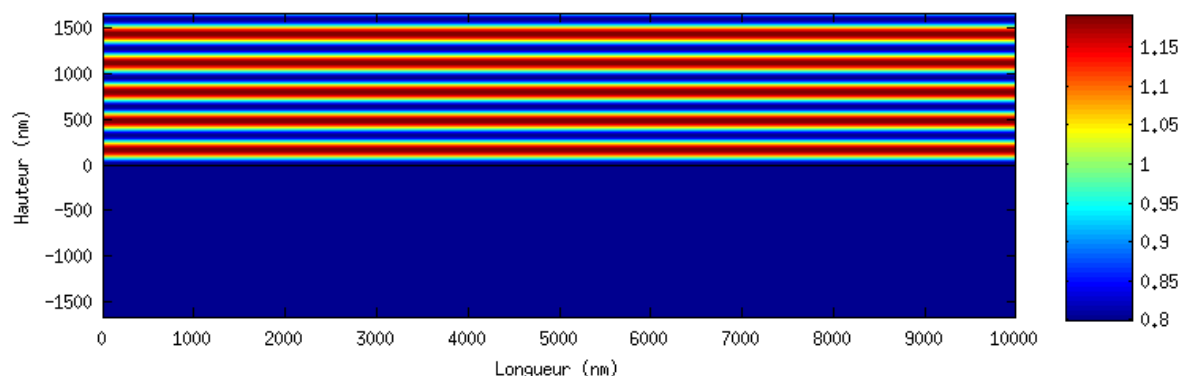
**Figure 4-16 : Comparaison des intensités diffusées pour un réseau périodique rugueux calculé par la méthode approchée au premier ordre. «  $I_p$  » : intensité du réseau périodique, «  $I_r$  » : intensité du profil rugueux, «  $I_{p+r}$  » : intensité du réseau rugueux.**

Dans le cas d'un profil de hauteur faible, ces résultats montrent que l'on peut extraire la rugosité de la même manière que pour une surface rugueuse simple à condition de considérer l'intensité diffusée hors des ordres de diffraction. Comme expliqué précédemment, la connaissance des matériaux, des conditions d'illumination et de détection (permettant de calculer le coefficient idéal) et une simple intégration du spectre de rugosité permet d'obtenir la rugosité. Dans cet exemple, on obtient sur la plage d'intégration de  $0^\circ$  à  $80^\circ$  en excluant la valeur du pic de diffraction ( $34,7^\circ$ ) une rugosité de  $1,5 \text{ \AA}$  (valeur purement numérique sans réelle existence physique) qui est identique à la rugosité théorique introduite par le profil rugueux intégrée sur la même plage angulaire.

#### **Validation du calcul hybride dans le cas d'une surface plane idéale**

Afin de valider la méthode de calcul hybride, on commence par étudier le cas où le réseau périodique parfait  $P$  se réduit à une surface plane. On calcule les cartographies de champs correspondant à la surface idéale, puis l'intensité diffusée par la perturbation grâce à la méthode présentée par l'équation (4.88). Cette étape permet de se ramener au cas du premier ordre « classique ».

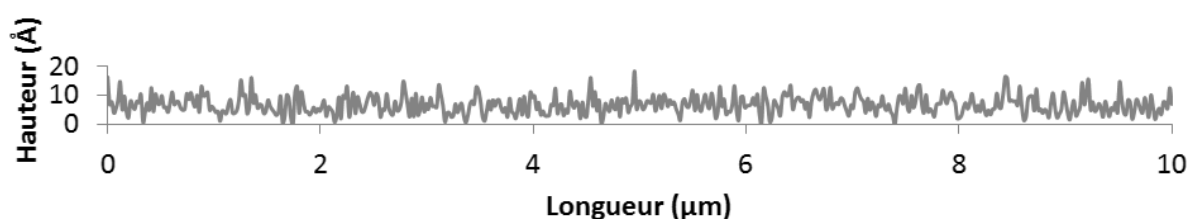
La source est monochromatique, de longueur d'onde  $632,8 \text{ nm}$  et polarisée rectilignement, suivant la direction TE. On considère un éclairage en incidence normale. On s'intéresse à une interface entre de l'air d'indice optique égal à 1 et un matériau d'indice réel 1,5. L'amplitude de l'onde plane incidente est de 1. La Figure 4-17 présente le module du champ  $E_y$  pour une surface plane. On retrouve en amplitude dans le demi-espace réfléchi (hauteurs positives) la somme de l'onde incidente d'amplitude 1 et de l'onde réfléchie d'amplitude 0,2. Du côté du substrat (hauteurs négatives), dans le demi-espace transmis, on obtient la valeur 0,8 correspondant à l'amplitude de l'onde transmise pour cette configuration.



**Figure 4-17 :  $|E_y|$  pour une surface plane d'altitude 0, de longueur  $10 \mu\text{m}$  éclairée en incidence normale par une onde incidente plane d'amplitude 1, en polarisation TE, résolution suivant la direction x 512 points, et suivant la direction z 1000 points.**

A partir de ces cartographies, on détermine les discontinuités à l'interface permettant le calcul des amplitudes grâce aux équations (4.78) et (4.79). Dans ce cas, la surface idéale utilisée dans le calcul étant une surface plane, la perturbation R considérée correspond au réseau rugueux. Dans cette configuration, il est important de noter que les hauteurs du réseau et de la rugosité doivent impérativement respecter les hypothèses des approximations du premier ordre pour permettre un calcul approché correct.

Le profil rugueux utilisé pour cette partie est représenté sur la Figure 4-18.

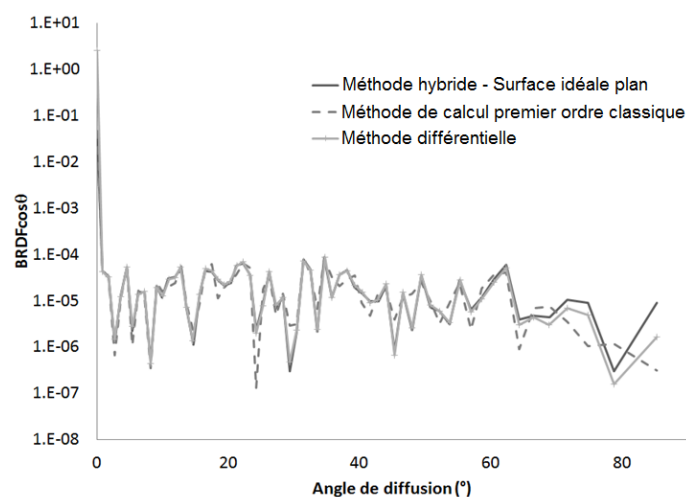


**Figure 4-18 : Profil rugueux d'amplitude de l'ordre de  $\lambda/100$ , avec 512 points et une longueur  $10 \mu\text{m}$ .**

Le calcul de l'intensité pour une surface rugueuse est validé en confrontant les différentes méthodes de calcul :

- méthode différentielle ;

- approximation du premier ordre ;
- approximation du premier ordre hybride.



**Figure 4-19 : BRDF  $\cos\theta$  selon les différentes méthodes de calcul, pour une surface rugueuse de hauteur maximale de l'ordre de  $\lambda/100$ , polarisation TE, incidence nulle.**

D'après la Figure 4-20, la méthode hybride et la méthode différentielle convergent vers le même résultat en intensité avec un écart moyen très faible de 3%. Concernant la méthode dite de premier ordre classique, l'écart avec les autres techniques est beaucoup plus grand. Ainsi l'écart entre le premier ordre classique et la méthode différentielle est de 35 %, et du même ordre de grandeur pour la méthode hybride. Plusieurs points atypiques expliquent ces écarts. Une hypothèse est que localement la rugosité générée aléatoirement ne respecte pas parfaitement l'hypothèse des pentes du profil faibles.

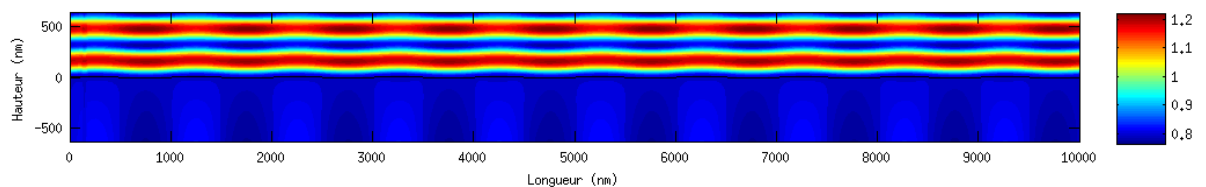
### **Validation du calcul hybride dans le cas d'une surface idéale périodique**

Dans cette partie, la surface idéale est la partie périodique du profil. Le réseau rugueux considéré sera un profil sinusoïdal rugueux d'amplitude  $\lambda/80$  et d'une rugosité théorique de  $\lambda/100$ .

La Figure 4-20 présente la cartographie du module du champ  $E_y$  pour un réseau sinusoïdal de longueur et de résolution identiques à celles de la Figure 4-17. A

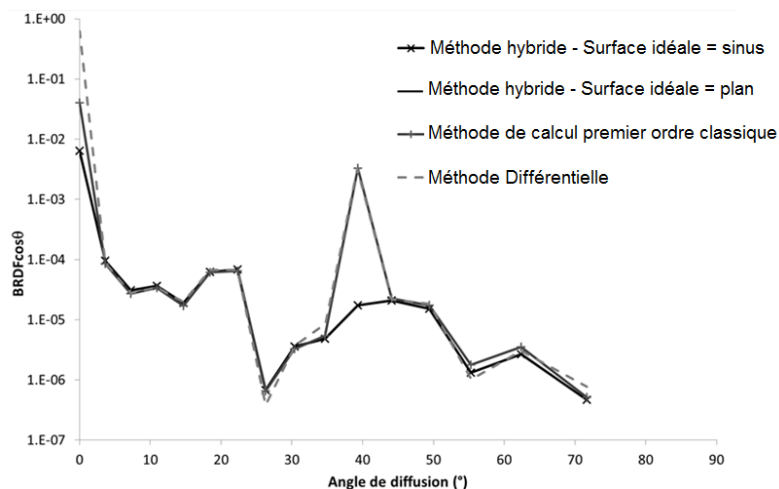


noter que la hauteur totale présentée sur cette figure est différente de la précédente. L'introduction de la zone modulée nécessite de concentrer l'échantillonnage en  $z$  dans cette zone afin de la modéliser au mieux. Avec un nombre de points constant, le pas diminue, ce qui réduit la hauteur étudiée. Par contre, on retrouve les mêmes résultats que dans le cas avec une surface plane. En amplitude dans le demi-espace réfléchi la somme de l'onde incidente d'amplitude 1 et de l'onde réfléchie d'amplitude 0,2. Dans le demi-espace transmis, on obtient la valeur 0,8 correspondant à l'amplitude de l'onde transmise pour cette configuration.



**Figure 4-20 :  $|E_y|$  pour une surface sinusoïdale d'amplitude  $\lambda/80$  d'altitude 0, de longueur  $10 \mu\text{m}$  éclairée en incidence normale par une onde incidente plane d'amplitude 1, en polarisation TE, résolution suivant la direction  $x$  512 points, et suivant la direction  $z$  1000 points.**

A partir des cartographies de champs, on détermine les amplitudes des champs et donc les intensités réfléchies et transmises. Ici, on présente les résultats obtenus dans le plan d'incidence et dans le demi-espace réfléchi. Si l'on prend l'exemple d'un profil sinusoïdal d'amplitude  $\lambda/80$  et de rugosité de l'ordre  $\lambda/100$ , on peut calculer l'intensité selon les différentes méthodes à notre disposition.



**Figure 4-21 : Intensité diffusée (BRDF cosθ) selon les différentes méthodes de calcul, pour un profil périodique sinusoïdal d'amplitude  $\lambda/80$  et de rugosité de l'ordre de  $\lambda/100$ , polarisation TE, incidence nulle.**

On peut noter sur la Figure 4-21 une bonne concordance entre toutes les méthodes. Le premier ordre correspond parfaitement à la méthode hybride avec comme surface parfaite un plan, car bien que la manière de calculer l'intensité diffère, le raisonnement est le même.

#### 4.2.3.5 Extraction de la rugosité

L'objectif de cette étude est in fine d'être capable de déterminer la rugosité liée au profil « R » à partir d'une mesure d'intensité diffusé par le réseau rugueux. A titre d'exemple, le cas de la polarisation TE est développé mais le cas de la polarisation TM peut être traité de manière analogue.

A partir de l'équation (4.88), la transformée de Fourier du profil rugueux intervient deux fois, ne permettant pas de l'isoler par une relation simple. En développant les produits de convolution, on peut écrire l'équation sous la forme :

$$I(\theta) = \frac{k^2 \cos^2 \theta}{k_i \cos \theta_i} \left| \tilde{R} * f + i\sigma \tilde{R} * g \right|^2 \Delta\sigma \quad 4.89$$

Avec

$$f = \frac{1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} TF \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \right) * (\tilde{n}_2 \partial_z (\delta \tilde{E}_y) + \partial_z (\delta \tilde{H}_x)) \quad 4.90$$

$$g = \frac{1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} TF \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \right) * \delta \tilde{H}_z \quad 4.91$$

Sous cette forme, l'expression est difficilement exploitable. Toutefois, nous allons étudier numériquement chaque terme de l'expression (4.89), de manière à déterminer si l'un des paramètres est négligeable devant l'autre, ce qui permettrait un calcul plus simple du paramètre R. Nous définissons les fonctions F et G telles que :

$$F = \tilde{R} * \left( \frac{1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} TF \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \right) * (\tilde{n}_2 \partial_z (\delta \tilde{E}_y) + \partial_z (\delta \tilde{H}_x)) \right) \quad 4.92$$

$$G = i \sigma \tilde{R} * \left( \frac{1}{\tilde{n}_1 + \tilde{n}_2} TF \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \overrightarrow{\text{grad}}^2 P}} \right) * \delta \tilde{H}_z \right) \quad 4.93$$

Nous simulons alors ces deux fonctions, dans le cas du réseau périodique défini précédemment. Les résultats sont présentés dans la figure 4.22. Nous remarquons que les valeurs de ces fonctions diffèrent d'approximativement une décade. Ce n'est pas un écart très important, mais nous pouvons pour la suite supposer que la fonction F est prédominante. L'erreur commise à ce stade n'est pas très importante, comme nous pouvons le voir en Figure 4-23, où nous avons représenté l'intensité I avec le seul terme F (équation (4.94)), comparé à l'expression complète (4.89) :

D'après les valeurs prises par ces deux variables, représentées sur la Figure 4-22, on fait l'hypothèse que G est négligeable devant F. L'équation (4.89) devient alors :

$$I(\theta) = \frac{k^2 \cos^2 \theta}{k_i \cos \theta_i} |\tilde{R} * f|^2 \quad 4.94$$

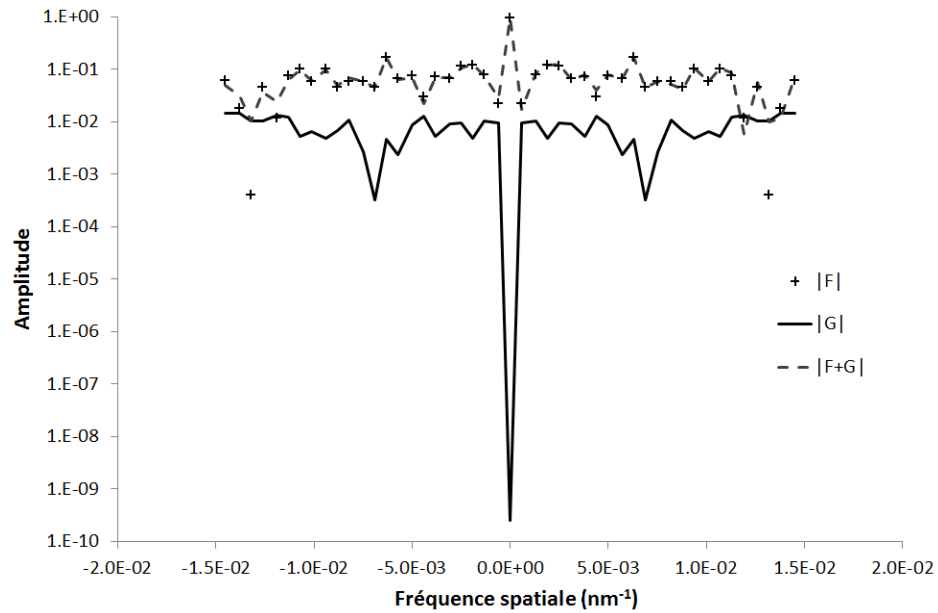


Figure 4-22 : Module de F et G en fonction des fréquences spatiales

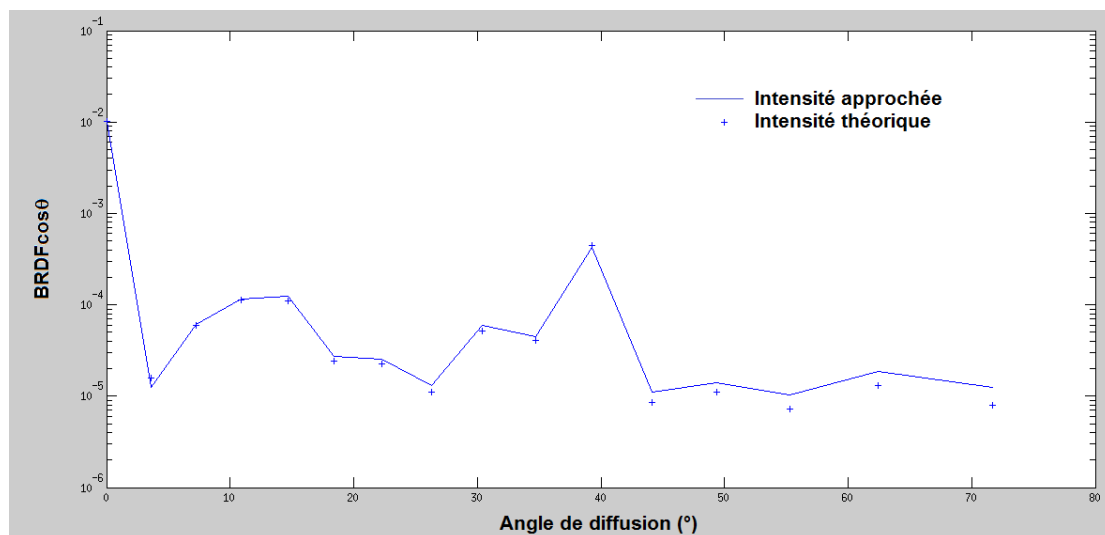


Figure 4-23 : Représentation de l'intensité fournie par l'équation (4.89) comparée avec l'intensité simplifiée fournie par l'équation (4.94).

D'après la formule (4.94), nous démontrons donc que l'intensité diffusée s'exprime grâce au produit de convolution de la transformée de Fourier de la contribution du profil rugueux avec une fonction  $f$  calculée à partir de la connaissance de la contribution périodique (forme parfaite du réseau étudié), ainsi que des propriétés optiques des matériaux.

D'après cette formule, il est possible à partir d'une courbe d'intensité mesurée dans le plan d'incidence d'extraire une valeur de la rugosité. En effet, si nous supposons que nous avons déterminé par une technique classique la forme périodique du réseau (par ellipsométrie sur les faisceaux spéculaires diffractés/réfléchis par exemple), nous pouvons calculer la fonction  $f$  grâce à une modélisation utilisant la méthode différentielle. Il s'agit ici d'un unique calcul. A ce stade, il reste à exploiter l'information mesurée entre les ordres de diffraction. Nous pouvons alors grâce à la méthode hybride procéder par inversion à partir des propriétés de la rugosité, puisque nous avons ici un lien immédiat entre l'expression de la rugosité et la formule de l'intensité diffusée.

Si nous supposons par exemple que la transformée de Fourier du profil rugueux s'exprime sous la forme :

$$\tilde{R}(\sigma) = \frac{A}{a} e^{-\frac{1}{4\pi} \left(\frac{\sigma}{a}\right)^2} \cdot e^{i\phi} \quad 4.95$$

avec  $\phi$  est une phase aléatoire.

L'intensité devient alors :

$$I(\theta) = \frac{k^2 \cos^2 \theta}{k_i \cos \theta_i} \left( \frac{A}{a} \right)^2 \left| e^{-\frac{1}{4\pi} \left(\frac{\sigma}{a}\right)^2} \cdot e^{i\phi} * f \right|^2 \quad 4.96$$

En ajustant les paramètres  $A$  et  $a$ , on peut estimer les propriétés de la rugosité de la surface.

## 4.3 Résultats expérimentaux

### 4.3.1 Analyse multi-échelle

Pour exploiter expérimentalement ces principes théoriques, des mesures de diffusion angulaires ont été réalisées sur les composants microélectroniques.

Le principe des mesures de diffusion a été présenté dans le paragraphe 4.1 toutefois, dans le cas des composants que nous avons à tester, nous avons accès à des zones de test de  $100\ \mu\text{m} \times 40\ \mu\text{m}$ . Ceci nous amène à travailler en faisceau focalisé, et donc à introduire des composants pour mettre en forme le faisceau. Ils sont composés d'une lentille convergente et de plusieurs diaphragmes. La conséquence est que l'encombrement mécanique de ces composants réduit la plage angulaire accessible dans le demi-espace réfléchi. Nous reviendrons plus tard sur cette contrainte. De plus, nous ne travaillons plus en faisceau parallèle, et devons prendre un soin particulier pour aligner la zone éclairée dans la bonne zone de l'échantillon, pour ne pas générer de signal parasite.

Les développements précédents ont présenté comment les paramètres de rugosité peuvent être extraits à partir des mesures de diffusion lumineuse. De manière à illustrer et valider ces principes, ces paramètres extraits seront comparés à ceux obtenus par des techniques de microscopie, par exemple par microscopie à force atomique (AFM).

Cependant, pour comparer rigoureusement les différentes techniques de mesure, il faut rappeler que la rugosité mesurée est liée à l'échelle d'observation [58]. Pour cela, les paramètres de mesures sont déterminants. Ainsi, la résolution et la taille de la fenêtre en AFM devront être définies en lien avec la plage angulaire dans le cas des mesures de diffusion.

Dans le cas d'une mesure par AFM d'une fenêtre carrée de longueur  $L$  avec une résolution dans les deux directions notée  $N$ , on définit la plage de pulsations spatiales accessibles telles que [58]:

$$\left[ \frac{2\pi}{L}; \frac{\pi N}{L} \right] \quad 4.97$$

Ainsi, selon le couple de paramètres choisis N et L, la mesure permet d'accéder à une large gamme de fréquences spatiales. Pour comparer avec exactitude les résultats obtenus par AFM à ceux obtenus par diffusion, il est primordial d'avoir les mêmes plages de pulsations spatiales.

Pour la mesure de diffusion, l'intervalle accessible dépend de la longueur d'onde et de la gamme des angles de diffusion mesurés (notés  $\theta$ ) et est donnée, dans le plan d'incidence, par :

$$\left[ k \sin \theta_{\min}; k \sin \theta_{\max} \right] \quad 4.98$$

Le lien entre ces termes est fourni par l'équation (4.50). Afin de déterminer les paramètres de mesures optimaux pour la comparaison des deux techniques, la gamme des pulsations spatiales accessibles pour différents paramètres de mesures a été calculée et récapitulée sur la Figure 4-24. Plusieurs paramètres expérimentaux permettent un recouvrement des pulsations spatiales accessibles par la microscopie et par diffusion, ce sont ces paramètres qui sont sélectionnés. Par exemple, les mesures AFM avec une résolution 512 x 512 points et une fenêtre carrée de 40  $\mu\text{m}$  de côté recouvrent totalement la gamme de pulsations spatiales accessibles en diffusion, pour des angles de diffusion mesurés entre 0° à 90° et une longueur d'onde incidente de 0,633  $\mu\text{m}$ . Il en est de même pour une résolution de 256 x 256 points avec une fenêtre de 10  $\mu\text{m}$  x 10  $\mu\text{m}$ .

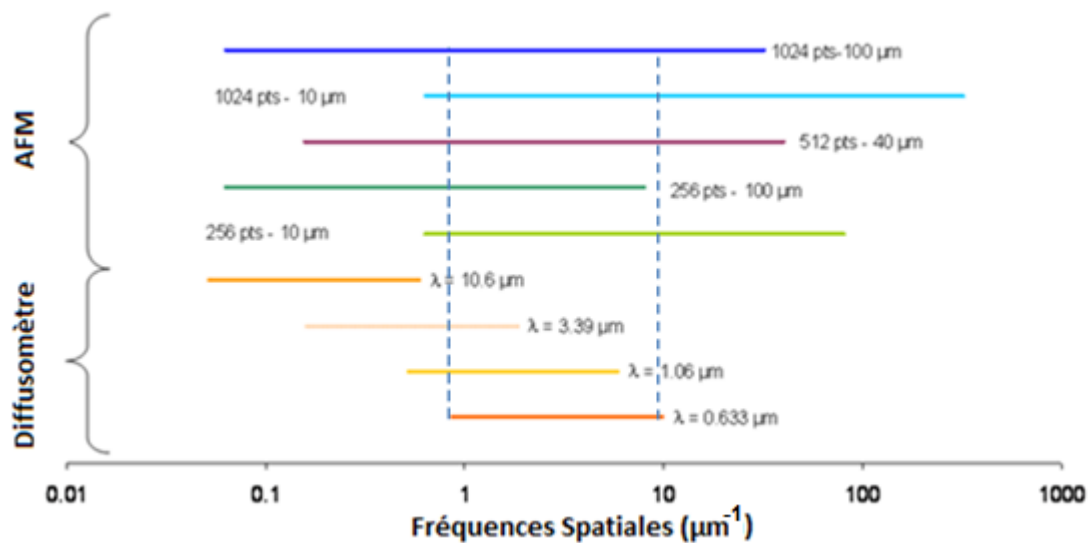


Figure 4-24 : Fréquences spatiales accessibles par le diffusomètre en fonction de la longueur d'onde de la source (les mesures réalisées dans le cadre de ce travail utilisent une source à 633 nm) et accessibles par l'AFM en fonction du nombre de points (pts) et de la longueur d'un côté de la zone mesurée (considérée carrée).

Notons à ce stade que le fait de ne pas pouvoir accéder à tout le secteur angulaire, entre  $0^\circ$  et  $90^\circ$ , pour cause d'encombrement mécanique conduit à réduire la fenêtre fréquentielle accessible.

Les deux techniques de mesure permettent de calculer le spectre de rugosité défini par l'équation (4.49). Dans le cas d'une mesure par microscopie du profil, la mesure étant échantillonnée, on doit prendre en compte la transformée de Fourier discrète, soit [58] :

$$\gamma_{pq} = \gamma(p\Delta\sigma_x, q\Delta\sigma_y) = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 \left| \hat{h}(p\Delta\sigma_x, q\Delta\sigma_y) \right|^2 \quad 4.99$$

Où  $\Delta\sigma_x = \Delta\sigma_y = \frac{\pi}{N\Delta x} = \frac{2\pi}{L}$

Son développement conduit à :



$$\gamma_{pq} = \gamma\left(p\frac{2\pi}{L}, q\frac{2\pi}{L}\right) = \left(\frac{L^2}{4\pi^2 N^4}\right) \times \left|\sum_{m,n} h\left(m\frac{L}{N}, n\frac{L}{N}\right) \times \exp\left[-j\frac{2\pi}{N}(mp + nq)\right]\right|^2 \quad 4.100$$

A partir de la connaissance du spectre de rugosité, l'équation (4.54) définissant la rugosité est adaptée pour prendre en compte les mesures discrètes sur une gamme de fréquences spatiales. Par ailleurs, une détermination de la rugosité, par intégration du spectre de rugosité ne peut être réalisée sur l'ensemble des pulsations spatiales. La plage d'intégration est donc bornée aux extrema des fréquences spatiales connues (et accessibles par la technique de mesure). Pour l'AFM, l'intégration est limitée aux bornes définies par l'équation (4.97) et pour la mesure de diffusion par l'équation (4.98). Les résultats numériques sont présentés dans le paragraphe suivant.

### 4.3.2 Cas d'une surface rugueuse

Dans un premier temps, le principe de l'analyse multi-échelle sera appliqué à des échantillons simples constitués de différentes couches de matériaux sur un substrat de silicium. Ainsi, la rugosité des matériaux utilisés par la suite sur des réseaux périodiques sera évaluée, fournissant une première idée des ordres de grandeurs recherchés. Ces expérimentations vont également participer à la validation du montage focalisé.

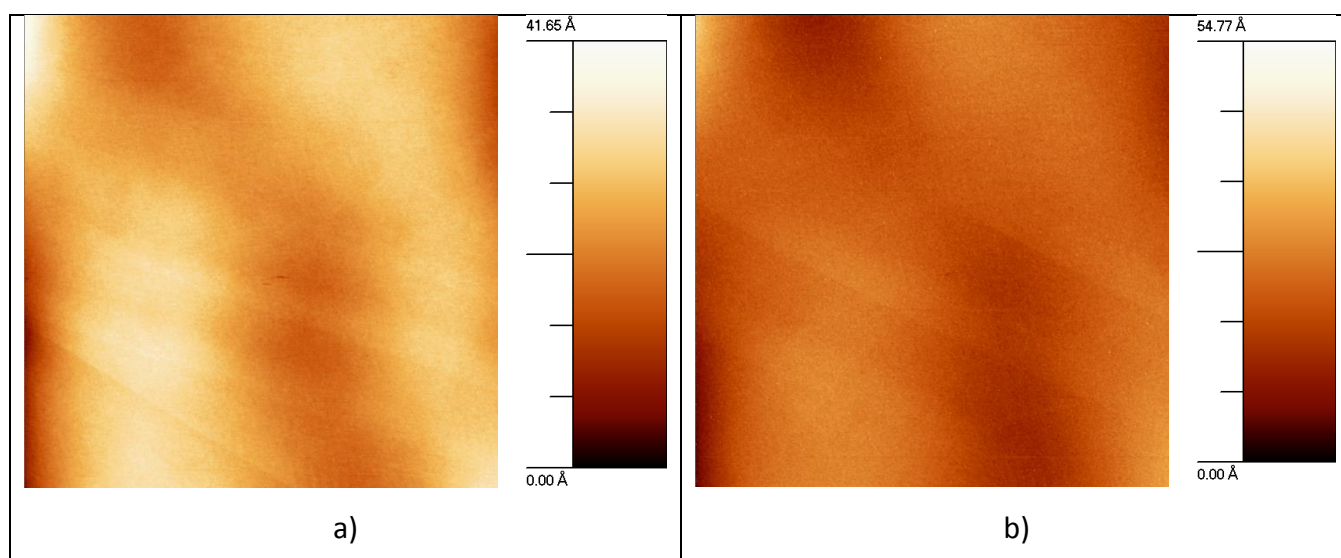
Quatre types de couches déposées sur un substrat en silicium ont été réalisés par les équipes de STMicroelectronics sur des wafers de 8 pouces de diamètre :

- oxyde de silicium (7,3 nm d'épaisseur) ;
- nitrure de silicium (60 nm d'épaisseur) ;
- oxyde de silicium (5 nm d'épaisseur) / silicium poly-cristallin (120 nm d'épaisseur) ;
- titane (7,5 nm d'épaisseur) / nitrure de titane (8.5 nm d'épaisseur) / tungstène (300 nm d'épaisseur).

Le choix de ces matériaux est déterminé par leur large utilisation dans le monde de la microélectronique mais également par leurs différentes valeurs

supposées de rugosité. Pour chaque échantillon, deux mesures sont réalisées : une mesure du profil AFM, une seconde de la diffusion lumineuse.

Afin de permettre une comparaison adéquate des deux mesures et en accord avec la Figure 4-24, les paramètres géométriques de la mesure AFM sont une résolution de 512 x 512 points pour une fenêtre de mesure carrée de 40  $\mu\text{m}$  de côté. La Figure 4-25 présente les mesures obtenues sur ces échantillons. Avant de calculer exactement les valeurs de la rugosité via la densité spectrale de puissance, on observe à partir de ces acquisitions deux comportements distincts. En effet, les couches d'oxyde de silicium et de nitrure de silicium présentent des états de surface très peu rugueux, voire quasi-plane. Les couches en silicium poly-cristallin et en tungstène présentent par contre un état de surface plus rugueux que les deux couches précédentes. Ceci est dû à la présence de grains liés à la forme cristalline de ces matériaux.



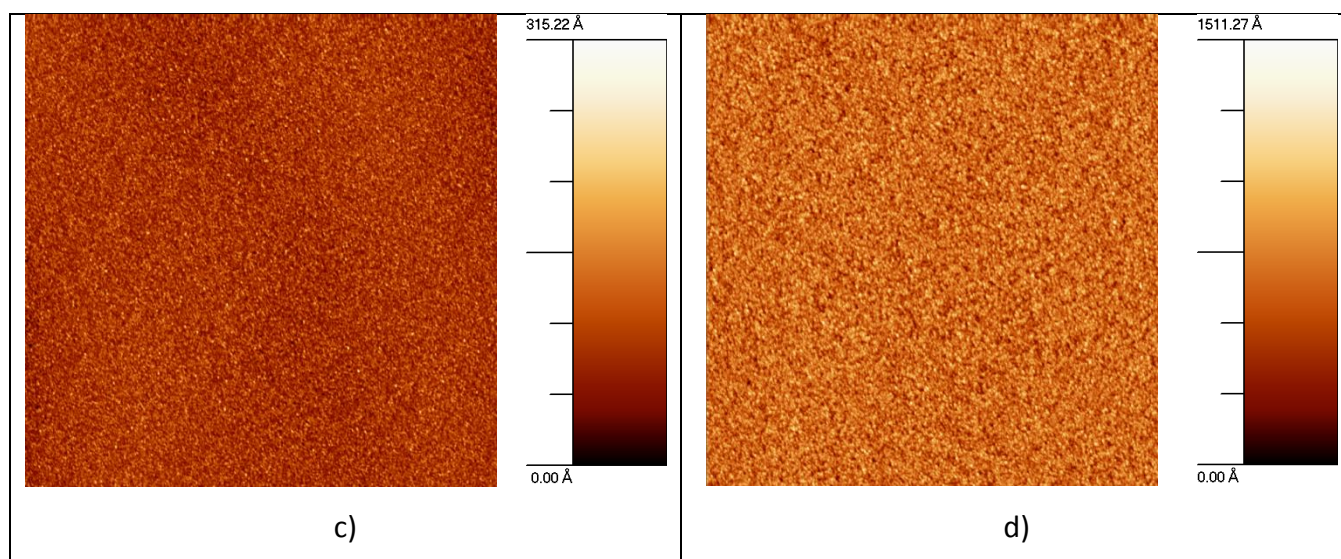


Figure 4-25 : Images AFM de 40x40 $\mu$ m de côté et une résolution de 512x512 points pour a) oxyde de silicium, b) nitrure de silicium, c) silicium poly-cristallin, d) tungstène.

Avant de présenter les mesures de diffusion sur ces mêmes échantillons, il est primordial de valider la nouvelle configuration expérimentale utilisant une lentille de focalisation. La Figure 4-26 présente les résultats expérimentaux pour les deux échantillons en silicium poly-cristallin et en tungstène et dans les deux conditions d'illumination. Les deux autres échantillons présentent un niveau de diffusion proche du bruit de mesure. Bien que développé pour mesurer des surfaces très faiblement rugueuses, les états de surfaces de ces deux dépôts ne génèrent que peu de diffusion, et a fortiori aux grands angles (de 50° à 90°).

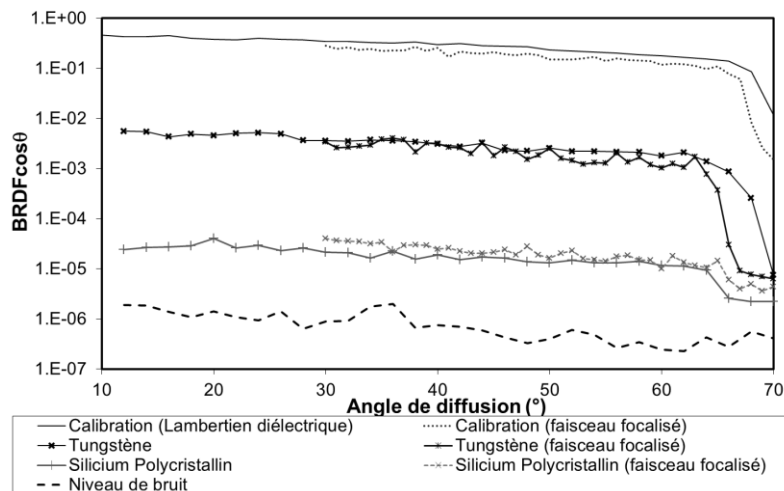


Figure 4-26 : BRDF  $\cos\theta$  en fonction de l'angle de diffusion pour différents matériaux et deux types de faisceau incident (parallèle et focalisé).

Afin de déterminer le spectre de rugosité, il est nécessaire de calculer le coefficient idéal « C » liant l'intensité au spectre de rugosité (cf. équation 4.48). Pour cela, il est impératif de connaître les valeurs des indices optiques des matériaux. Pour la majorité des couches, ces paramètres ont été mesurés par ellipsométrie à l'exception du tungstène et du titane dont les valeurs ont été prises dans la littérature [75]–[77]. La Figure 4-27 présente le résultat du calcul du spectre de rugosité à partir des mesures de profil par AFM et des mesures de diffusion lumineuse pour le dépôt de silicium poly-cristallin, en considérant que le profil des deux couches constituant l'échantillon sont identiques.

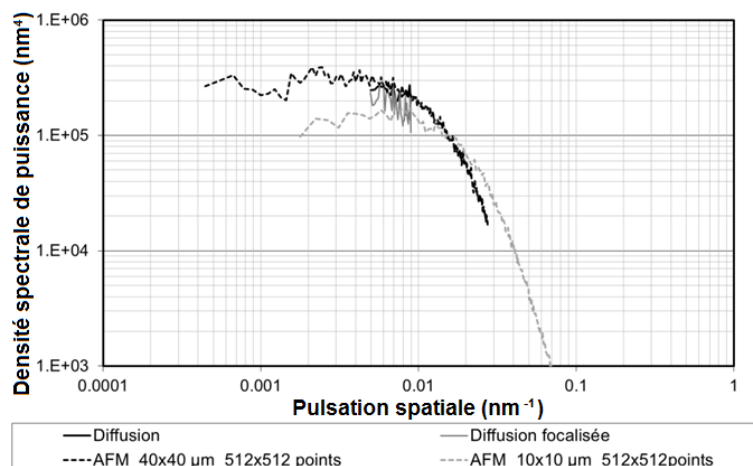


Figure 4-27 : Représentation du spectre de rugosité pour les mesures de diffusion et AFM pour le silicium poly-cristallin.

D'après la définition donnée par l'équation (4.54), la rugosité est calculée par intégration du spectre de rugosité sur la bande de pulsations spatiales accessibles expérimentalement, c'est-à-dire  $[4.96 \times 10^{-3} - 8.92 \times 10^{-3}] \text{ nm}^{-1}$  (correspondant à une longueur d'onde incidente de 632,8 nm et une mesure des angles de diffusion dans la plage  $[30^\circ - 64^\circ]$ ). Le Tableau 4-1 résume l'ensemble des rugosités calculées pour le silicium poly-cristallin et le tungstène selon les méthodes de mesure et pour la même plage de pulsations spatiales.

$R_q$ $[4.96 \times 10^{-3} - 8.92 \times 10^{-3}] \text{ nm}^{-1}$ ou $[30^\circ - 64^\circ]$	$R_q$ Diffusion (nm)	$R_q$ Diffusion focalisée (nm)	$R_q$ AFM (nm) $(40 \times 40 \mu\text{m})$ $(512 \times 512 \text{ points})$
Tungstène	6,4	5,6	6,7
Silicium poly-cristallin	0,4	0,4	0,9

Tableau 4-1 : Rugosités obtenues à partir des mesures des surfaces planes par diffusion et par AFM.

La concordance des résultats entre les techniques de mesures de diffusion (non focalisée et focalisée) est très bonne lorsque le matériau est peu rugueux. En effet, l'erreur entre ces deux techniques est inférieure à 1 nm, correspondant aux incertitudes liées à la mesure et aux calculs du coefficient idéal C. Une étude de sensibilité sur la détermination de ce paramètre a été réalisée, induisant au maximum une erreur de 5% sur la valeur de la rugosité finale. Les différentes sources d'incertitude pour la détermination de ce paramètre sont :

- l'impact des couches inférieures dans la mesure de diffusion avec l'hypothèse que toutes les couches présentent le même profil de rugosité ;
- leur prise en compte dans le calcul du coefficient « C » via l'indice complexe optique de chaque matériau et leur épaisseur ;
- la zone de mesure légèrement différente puisque l'échantillon doit être manipulé entre les équipements et la contamination.

Etant donné les niveaux de rugosité recherchés, la moindre différence aura un impact immédiat sur le résultat. Il est cependant important de noter qu'une

variation sur la mesure de diffusion (l'erreur sur le positionnement du détecteur par exemple de  $0,1^\circ$ ) n'aura qu'un impact faible sur le résultat, inférieur à 1%, grâce à l'intégration du spectre de rugosité. Cette intégration a pour effet de moyenner le résultat, permettant de lisser les erreurs ponctuelles.

La comparaison avec les mesures de microscopie à force atomique permet de valider l'ordre de grandeur de la rugosité sur les surfaces étudiées. De ce point de vue, les valeurs obtenues sur chacun des échantillons sont satisfaisantes, avec un écart également inférieur à 1 nm. Nous ne pouvons pas à ce stade certifier que la zone mesurée sur chacun des équipements est la même.

### 4.3.3 Résultats réseau rugueux avec méthode hybride

Quelques premières mesures de diffusion lumineuse sur des réseaux de nanotechnologie ont été réalisées. La structure étudiée est constituée d'une matrice de réseau en silicium poly-cristallin et présentée par la Figure 4-28.

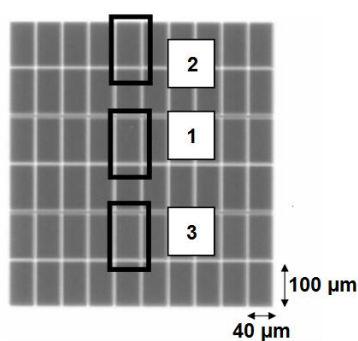


Figure 4-28 : Matrice de réseaux.

La matrice est constituée par la succession de six lignes de dix réseaux identiques. La période des réseaux est identique pour deux lignes complètes successives. Trois géométries sont donc disponibles, sachant que le CD est de 100 nm pour tous, la période vaudra pour :

- l'échantillon « STM 1 » 240 nm ;
- l'échantillon « STM 2 » 280 nm ;
- l'échantillon « STM 3 » 320 nm.

Comme précédemment pour les échantillons plans, une première mesure est réalisée par AFM sur les trois échantillons référencés sur la Figure 4-28.

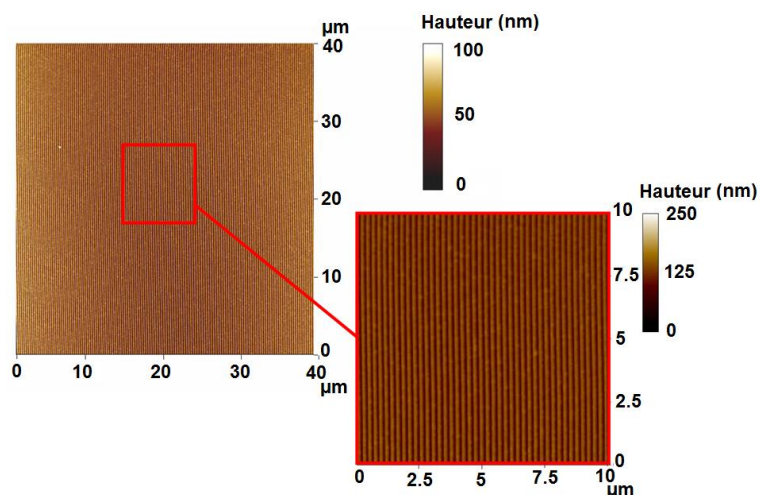


Figure 4-29 : Mesure AFM sur l'échantillon « STM 2 » (40 μm x 40 μm, 512 x 512 points) avec un zoom sur le réseau (10 μm x 10 μm avec une résolution de 256 x 256 points).

Sur ces échantillons, des mesures classiques (ellipsométrie, présentée auparavant) permettent également de déterminer à distance la partie périodique des profils.

Pour accéder aux paramètres de rugosité, les mesures de diffusion sont effectuées dans la configuration focalisée en incidence normale. Un exemple est présenté par la Figure 4-30.

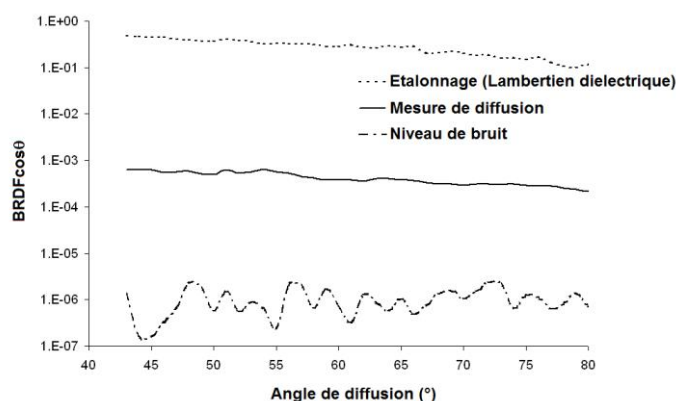


Figure 4-30 : Mesure d'intensité en fonction de l'angle de diffusion sur l'échantillon STM2, d'un lambertien diélectrique et du niveau de bruit.

Comme expliqué auparavant, seuls les angles supérieurs à  $40^\circ$  sont accessibles pour des raisons mécaniques. L'information de rugosité est donc relative à cette plage angulaire. L'indice optique du matériau est de 4.

D'après le paragraphe 4.2.2.5, les paramètres de la partie périodique des profils permettent de calculer la fonction  $f$  grâce à une méthode électromagnétique rigoureuse. A ce stade, nous pouvons exploiter la méthode hybride développée précédemment afin d'ajuster au mieux la courbe expérimentale et extraire les paramètres de rugosité.

A partir de ces mesures, une estimation des paramètres de rugosité peut être obtenue. Les calculs n'ont malheureusement pas pu être menés jusqu'au bout durant ce travail de doctorat. En effet de nombreuses validations restent à mener à ce stade afin de pouvoir utiliser cette méthode en routine. En particulier, nous devons vérifier précisément les limites de la simplification opérée en paragraphe 4.2.2.5 pour négliger la fonction  $g$ , pour divers paramètres de profils périodiques et divers matériaux. De plus, une extraction simpliste des paramètres de rugosité a été proposée, mais nous pourrions aller plus loin en détaillant des méthodes d'inversion plus élaborées, que nous n'avons malheureusement pas pu aborder [78].

## Conclusion

Dans ce chapitre, une méthode de calcul basée sur l'approximation du premier ordre a été développée dans le but d'extraire la rugosité sur des réseaux périodiques présents en nanotechnologie. Cette méthode nécessite une connaissance de la structure périodique, pour permettre de calculer via un calcul rigoureux le champ diffracté uniquement par rapport au réseau périodique. Cette contrainte ne pose pas de problème dans le contexte de la microélectronique,



puisque la structure périodique est déterminée par scatterometrie (comme présenté au chapitre 3). Cette application a orienté l'étude vers cette méthode. La contribution de la partie rugueuse est ainsi dissociée, ce qui permet d'étudier des structures dont les dimensions (l'amplitude du réseau principalement) ne sont pas négligeables devant la longueur d'onde.

Cette nouvelle technique a été validée numériquement grâce à différents exemples d'échantillons en comparant les intensités calculées avec d'autres méthodes de calcul. Ainsi, cette nouvelle méthode est adaptée aux traitements des cas qu'on pourrait qualifier de standard comme une surface plane à laquelle a été ajouté un profil rugueux. Cette technique est également adaptée aux traitements de surfaces périodiques rugueuses dont les amplitudes sont ou non négligeables devant la longueur d'onde.

## Conclusions et Perspectives

Durant cette thèse, différents aspects du monde de la microélectronique ont été abordés en se focalisant sur la conception et la métrologie des composants. Les différents procédés de fabrication permettent de comprendre la complexité des phénomènes mis en jeu et nécessite une grande expertise. Ces travaux de thèse ont été possibles grâce à l'implication des différentes équipes de STMicroelectronics, ainsi qu'aux connaissances des chercheurs de l'Institut Fresnel.

Nous avons développé d'un point de vue industriel une méthodologie pour la création et l'expérimentation de nouvelles recettes de mesures dédiées aux suivis de production en ligne par ellipsométrie et par scatterometrie. Des empilements innovants comme les nanocristaux de silicium ont été étudiés et mesurés par ces techniques optiques. Nous avons également testé et évalué la possibilité de mesurer des réseaux de trous cylindriques présents dans une couche d'oxyde de silicium grâce à un équipement de métrologie commercial. Ces mesures ont été confrontées à d'autres techniques disponibles telles que la microscopie électronique à balayage et à transmission. La faisabilité d'une telle analyse a été vérifiée et un gain net en répétabilité a été démontré vis-à-vis des mesures par microscopie électronique à balayage. Il serait intéressant de poursuivre cette étude de manière statistique en plaçant la mesure sur une ligne de production pour étudier la reproductibilité du traitement des mesures. Des adaptations des modèles optiques seront à apporter pour prendre en compte les variations des propriétés des matériaux, car entre les échantillons de tests et les produits réalisés par STMicroelectronics les empilements diffèrent.

Nous avons également travaillé sur le développement d'une nouvelle méthode de modélisation de l'effet de la rugosité sur la diffusion par des échantillons périodiques de dimension sub-micrométrique. Cette technique s'appuie sur une extension de l'approximation de Born à des surfaces périodiques dans une direction de l'espace et dont l'amplitude n'est plus négligeable devant la longueur d'onde. De nombreux tests numériques ont été réalisés afin de valider et d'évaluer

les limitations de cette généralisation. Ainsi, nous sommes capables de fournir une mesure rapide et fiable de la valeur de la rugosité avec une connaissance a priori du réseau périodique, qui pourrait être mesuré par scatterometrie par exemple au préalable. Cette partie théorique n'a pas encore permis de fournir un protocole implantable en routine, mais les simulations sont prometteuses et vont nécessiter de plus longues investigations.

## Références

- [1] G. Moore, "Cramming more components onto integrated circuits," *Electronics*, vol. 38, no. 8, pp. 114–117, 1965.
- [2] G. Moore, "Progress in digital integrated electronics," *Electron Devices Meet. 1975 Int.*, pp. 11–13, 1975.
- [3] K. K. Schuegraf, *Handbook of Thin-Film Deposition Processes and Techniques*, First Edit. Noyes Publications, 1988.
- [4] S. Rojas, P. Serra, W. S. Wu, F. Santarelli, G. C. Sarti, and F. Minni, "Process characterisation for LPCVD deposition of SiO<sub>2</sub> films from TEOS liquid source," *Le J. Phys. Colloq.*, vol. 50, no. C5, pp. C5–83–C5–90, May 1989.
- [5] W. B. Glendinning and J. N. Helbert, *Handbook of VLSI Microlithography: Principles, Technology, and Applications*, First Edit. Noyes Publications, 1991.
- [6] H. L. Maynard, N. Layadi, and J. T. C. Lee, "Plasma etching of submicron devices: in situ monitoring and control by multi-wavelength ellipsometry," *Thin Solid Films*, vol. 313–314, pp. 398–405, Feb. 1998.
- [7] I. P. Herman, "Optical diagnostics for thin film processing.," *Annu. Rev. Phys. Chem.*, vol. 54, pp. 277–305, Jan. 2003.
- [8] W. Kern, *Handbook of Semiconductor Wafer Cleaning Technology*. Noyes Publications, 1993.
- [9] N. Jedidi, "Applications de techniques avancées de contrôle des procédés en industrie du semi-conducteur.," Thèse de doctorat de l'école des mines de Saint Etienne, 2009.

- [10] J. R. Goldstein, J., Newbury, D.E., Joy, D.C., Lyman, C.E., Echlin, P., Lifshin, E., Sawyer, L., Michael, *Scanning Electron Microscopy and X-ray Microanalysis*, 3rd ed. .
- [11] A. Habermas, D. Hong, M. F. Ross, and W. R. Livesay, "193-nm CD shrinkage under SEM: modeling the mechanism," in *Metrology, Inspection, and Process Control for Microlithography XVI*, 2002, pp. 92–101.
- [12] P. Eaton and P. West, *Atomic Force Microscopy*. Oxford University Press, 2010.
- [13] M. Tabet and F. Urban, "Deconvolution of tip affected atomic force microscope images and comparison to Rutherford backscattering spectrometry," *J. Vac. Sci. Technol. B*, 1997.
- [14] J. Foucher, N. Rana, and C. Dezaudier, "3D-AFM enhancement for CD metrology dedicated to lithography sub-28-nm node requirements," in *Proc. SPIE 7638, Metrology, Inspection, and Process Control for Microlithography XXIV*, 2010, pp. 763802–763802–15.
- [15] J. Melngailis, "Focused ion beam technology and applications," *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanom. Struct.*, vol. 5, no. 2, p. 469, Mar. 1987.
- [16] D. B. Williams and C. B. Carter, *Transmission Electron Microscopy*. Boston, MA: Springer US, 1996.
- [17] R. M. A. Azzam and N. M. Bashara, *Ellipsometry and polarized light*. Amsterdam, 1977.
- [18] S. N. Jaspersen and S. E. Schnatterly, "An Improved Method for High Reflectivity Ellipsometry Based on a New Polarization Modulation Technique," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 40, no. 6, p. 761, 1969.
- [19] B. Drevillon, J. Perrin, R. Marbot, A. Violet, and J. L. Dalby, "Fast polarization modulated ellipsometer using a microprocessor system for digital Fourier analysis," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 53, no. 7, p. 969, 1982.

- [20] R. M. A. Azzam, "Ellipsometry: a sophisticated tool for optical metrology," in *Optical Metrology Roadmap for the Semiconductor, Optical, and Data Storage Industries*, 2000, pp. 184–196.
- [21] E. Elizalde, J. M. Frigerio, and J. Rivory, "Determination of thickness and optical constants of thin films from photometric and ellipsometric measurements.," *Appl. Opt.*, vol. 25, no. 24, p. 4557, Dec. 1986.
- [22] M. Elias, C. Magnain, and J. M. Frigerio, "Contribution of surface state characterization to studies of works of art.," *Appl. Opt.*, vol. 49, no. 11, pp. 2151–60, Apr. 2010.
- [23] J. B. Theeten and D. E. Aspnes, "Ellipsometry in Thin Film Analysis," *Annu. Rev. Mater. Sci.*, vol. 11, no. 1, pp. 97–122, Aug. 1981.
- [24] R. M. A. Azzam, "Ellipsometry for the Characterization of Optical Coatings.," *Rev. Laser Eng.*, vol. 24, no. 2, pp. 209–219, 1996.
- [25] O. Gilbert, "Ellipsométrie sur champ spéculaire et diffus : théorie et expérience," Thèse de doctorat de l'université Paul Cézanne - Aix-Marseille III, 2004.
- [26] F. Bernoux and J.-P. Piel, "Ellipsométrie. Théorie," *Tech. l'Ingénieur*, 2003.
- [27] S. Boyd and L. Vandenberghe, *Convex Optimization*, 7th ed. Cambridge University Press, 2008.
- [28] L. Arnaud, "Diffraction et diffusion de la lumière: modélisation tridimensionnelle et application à la métrologie de la microélectronique et aux techniques d'imagerie sélective en milieu diffusant," Thèse de doctorat de l'université Paul Cézanne, Aix-Marseille III, 2008.
- [29] D. W. Marquardt, "An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters," *J. Soc. Ind. Appl. Math.*, vol. 11, no. 2, pp. 431–441, Jun. 1963.

- [30] S. Soulan, "Développement de la scattérométrie dynamique pour le suivi en temps réel de procédés. Application à la microélectronique," Thèse de doctorat de l'université Joseph Fourier - Grenoble I, 2008.
- [31] H.-T. Huang and F. L. Terry Jr, "Spectroscopic ellipsometry and reflectometry from gratings (Scatterometry) for critical dimension measurement and in situ, real-time process monitoring," *Thin Solid Films*, vol. 455–456, pp. 828–836, May 2004.
- [32] H.-T. Huang and F. L. Terry Jr, "Erratum to 'Spectroscopic ellipsometry and reflectometry from gratings (Scatterometry) for critical dimension measurement and in situ, real-time process monitoring' [*Thin Solid Films* 455–456 (2004) 828–836]," *Thin Solid Films*, vol. 468, no. 1–2, pp. 339–346, Dec. 2004.
- [33] M. Adel, M. Ghinovker, B. Golovanevsky, P. Izikson, E. Kassel, D. Yaffe, A. M. Bruckstein, R. Goldenberg, Y. Rubner, and M. Rudzsky, "Optimized Overlay Metrology Marks: Theory and Experiment," *IEEE Trans. Semicond. Manuf.*, vol. 17, no. 2, pp. 166–179, May 2004.
- [34] J. Amouroux, V. Della Marca, E. Petit, D. Deleruyelle, M. Putero, C. Muller, P. Boivin, E. Jalaguier, J.-P. Colonna, P. Maillot, and L. Fares, "Growth and In-line Characterization of Silicon Nanodots Integrated in Discrete Charge Trapping Non-volatile Memories," *MRS Proc.*, vol. 1337, pp. mrss11–1337–q01–04, Jun. 2011.
- [35] J. Amouroux, "Procédé de croissance et caractérisation avancée de nanocristaux de silicium pour une intégration dans les mémoires non-volatiles," Thèse de doctorat d'Aix-Marseille Université, 2013.
- [36] F. Bertin, T. Baron, D. Mariolle, F. Martin, A. Chabli, and M. Dupuy, "Characterization of Deposited Nanocrystalline Silicon by Spectroscopic Ellipsometry," *Phys. status solidi*, vol. 175, no. 1, pp. 405–412, Sep. 1999.

- [37] A.-S. Keita, A. E. Naciri, F. Delachat, M. Carrada, G. Ferblantier, and A. Slaoui, "Spectroscopic ellipsometry investigation of the optical properties of nanostructured Si/SiN<sub>x</sub> films," *J. Appl. Phys.*, vol. 107, no. 9, p. 093516, 2010.
- [38] J. Bao, "An optical metrology system for lithography process monitoring and control," Ph D., University of California, Berkeley, 2003.
- [39] O. Sorkhabi, H. Pois, H. Chu, Y. Wen, J. Opsal, and W. D. Kim, "Performance of Measuring Contact Holes using the Opti-Probe 7341 3-D RT/CD Technology," in *Metrology, Inspection, and Process Control for Microlithography XIX*, 2005, pp. 912–921.
- [40] J. C. Lam, A. Gray, S. Chen, and J. Richter, "Measuring Contact Hole Corner Rounding Uniformity Using Optical Scatterometry," in *SPIE 24th European Mask and Lithography Conference*, 2008, vol. 6792, pp. 679212–679212–4.
- [41] H. Chouaib and Q. Zhao, "Nanoscale optical critical dimension measurement of a contact hole using deep ultraviolet spectroscopic ellipsometry," *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanom. Struct.*, vol. 31, no. 1, p. 011803, 2013.
- [42] R. Quintanilha, J. Hazart, P. Thony, and D. Henry, "Application of spectroscopic scatterometry method in hole matrices analysis," in *Metrology, Inspection, and Process Control for Microlithography XIX*, 2005, pp. 204–216.
- [43] M. G. Moharam and T. K. Gaylord, "Rigorous coupled-wave analysis of planar-grating diffraction," *J. Opt. Soc. Am.*, vol. 71, no. 7, p. 811, Jul. 1981.
- [44] T. Linton, M. Chandhok, B. J. Rice, and G. Schrom, "Determination of the line edge roughness specification for 34 nm devices," in *Digest. International Electron Devices Meeting*, 2002, pp. 303–306.



- [45] B. Yaakovovitz, Y. Cohen, and Y. Tsur, "Line edge roughness detection using deep UV light scatterometry," *Microelectron. Eng.*, vol. 84, no. 4, pp. 619–625, Apr. 2007.
- [46] V. Constantoudis, G. P. Patsis, L. H. a. Leunissen, and E. Gogolides, "Line edge roughness and critical dimension variation: Fractal characterization and comparison using model functions," *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanom. Struct.*, vol. 22, no. 4, p. 1974, 2004.
- [47] J. M. Bennett and L. Mattsson, *Introduction to surface roughness and scattering*. Washington D.C., Optical Society of America, 1989.
- [48] T. A. Germer, "Measuring interfacial roughness by polarized optical scattering," in *Light Scattering and Nanoscale Surface Roughness*, A. A. Maradudin, Ed. Springer US, 2007, pp. 259–284.
- [49] T. Germer, "Measurement of Roughness of Two Interfaces of a Dielectric Film by Scattering Ellipsometry," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 85, no. 2, pp. 349–352, Jul. 2000.
- [50] M. Saillard, E. Popov, L. Tsonev, L. Scandella, and N. Kruse, "Light diffraction from rough gratings.," *Appl. Opt.*, vol. 34, no. 22, pp. 4883–91, Aug. 1995.
- [51] A. Kato and F. Scholze, "Effect of line roughness on the diffraction intensities in angular resolved scatterometry," *Appl. Opt.*, vol. 49, no. 31, p. 6102, Oct. 2010.
- [52] C. Amra, C. Grezes-Besset, P. Roche, and E. Pelletier, "Description of a scattering apparatus: application to the problems of characterization of opaque surfaces.," *Appl. Opt.*, vol. 28, no. 14, pp. 2723–30, Jul. 1989.
- [53] C. Amra, "First-order vector theory of bulk scattering in optical multilayers," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 10, no. 2, p. 365, Feb. 1993.

- [54] C. Amra, "Light scattering from multilayer optics. I. Tools of investigation," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 11, no. 1, p. 197, Jan. 1994.
- [55] M. Born and E. Wolf, *Principles of optics*, Seventh Ed. Cambridge University Press, 1999.
- [56] P. Bousquet, F. Flory, and P. Roche, "Scattering from multilayer thin films: theory and experiment," *J. Opt. Soc. Am.*, vol. 71, no. 9, p. 1115, Sep. 1981.
- [57] J. M. Elson, "Theory of light scattering from a rough surface with an inhomogeneous dielectric permittivity," *Phys. Rev. B*, vol. 30, no. 10, pp. 5460–5480, Nov. 1984.
- [58] C. Deumié, R. Richier, P. Dumas, and C. Amra, "Multiscale roughness in optical multilayers: atomic force microscopy and light scattering.," *Appl. Opt.*, vol. 35, no. 28, pp. 5583–94, Oct. 1996.
- [59] C. Ruppe and a. Duparré, "Roughness analysis of optical films and substrates by atomic force microscopy," *Thin Solid Films*, vol. 288, no. 1–2, pp. 8–13, Nov. 1996.
- [60] P. Roche and E. Pelletier, "Characterizations of optical surfaces by measurement of scattering distribution.," *Appl. Opt.*, vol. 23, no. 20, p. 3561, Oct. 1984.
- [61] C. Amra, D. Torricini, and P. Roche, "Multiwavelength (0.45–10.6  $\mu\text{m}$ ) angle-resolved scatterometer or how to extend the optical window," *Appl. Opt.*, vol. 32, no. 28, pp. 5462–5474, 1993.
- [62] C. Amra, "Light scattering from multilayer optics. II. Application to experiment," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 11, no. 1, p. 211, Jan. 1994.
- [63] L. Arnaud, G. Georges, C. Deumie, and C. Amra, "Etude de la diffusion par des réseaux rugueux et applications," in *Huitième colloque international francophone Contrôles et Mesures Optiques pour l'Industrie (CMOI)*, 2007.

- [64] M. Saillard and A. Sentenac, "Rigorous solutions for electromagnetic scattering from rough surfaces," *Waves in Random Media*, vol. 11, no. 3, pp. 103–137, Jul. 2001.
- [65] T. M. Elfouhaily and C.-A. Guérin, "A critical survey of approximate scattering wave theories from random rough surfaces," *Waves in Random Media*, vol. 14, no. 4, pp. R1–R40, Oct. 2004.
- [66] M. Nevière and E. Popov, *Light propagation in periodic media: differential theory and design*, First edit. CRC Press, 2002.
- [67] H. Giovannini and C. Amra, "Scattering-reduction effect with overcoated rough surfaces: theory and experiment," *Appl. Opt.*, vol. 36, no. 22, p. 5574, Aug. 1997.
- [68] L. Arnaud, G. Georges, C. Deumié, and C. Amra, "Discrimination of surface and bulk scattering of arbitrary level based on angle-resolved ellipsometry: Theoretical analysis," *Opt. Commun.*, vol. 281, no. 6, pp. 1739–1744, Mar. 2008.
- [69] L. Arnaud, G. Georges, J. Sorrentini, M. Zerrad, C. Deumié, and C. Amra, "An enhanced contrast to detect bulk objects under arbitrary rough surfaces.," *Opt. Express*, vol. 17, no. 7, pp. 5758–73, Mar. 2009.
- [70] L. Li, "Formulation and comparison of two recursive matrix algorithms for modeling layered diffraction gratings," *J. Opt. Soc. Am. A*, vol. 13, no. 5, p. 1024, May 1996.
- [71] S. Maure, "Effets d'interface et de volume dans le processus des pertes optiques dans les structures planaires multicouches - Application à la diffusion piégée et aux cavités luminescentes," Thèse de doctorat de l'université Paul Cézanne - Aix-Marseille III, 1996.

- [72] A. Vauselle, L. Arnaud, G. Georges, C. Amra, C. Deumié, and P. Maillot, "Roughness influence on periodic gratings and application to optical metrology of roughness," in *Reflection, Scattering, and Diffraction from Surfaces II*, 2010, p. 77920W–77920W–8.
- [73] A. Vauselle, P. Maillot, G. Georges, and C. Deumié, "Micro Roughness Determination Of Periodic Microelectronics Structures Using Optical Far Field Measurements," in *Frontiers of Characterization and Metrology for Nanoelectronics*, 2011, vol. 314, pp. 314–318.
- [74] A. Vauselle, P. Maillot, G. Georges, and C. Deumié, "Optical far field measurements applied to microroughness determination of periodic microelectronic structures," in *Metrology, Inspection, and Process Control for Microlithography XXV*, 2011, pp. 797112–797112–11.
- [75] D. Davazoglou, G. Pallis, V. Psycharis, M. Gioti, and S. Logothetidis, "Structure and optical properties of tungsten thin films deposited by pyrolysis of W(CO)<sub>6</sub> at various temperatures," *J. Appl. Phys.*, vol. 77, no. 11, p. 6070, 1995.
- [76] P. Johnson and R. Christy, "Optical constants of transition metals: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, and Pd," *Phys. Rev. B*, vol. 9, no. 12, pp. 5056–5070, Jun. 1974.
- [77] SOPRA, "N&K Database." [Online]. Available: <http://www.sopra-sa.com/> .
- [78] J. R. Fienup, "Phase retrieval algorithms: a comparison.," *Appl. Opt.*, vol. 21, no. 15, pp. 2758–2769, 1982.

# Acronymes

AFM	Atomic Force Microscope
BARC	Bottom Anti-Reflective Coating
BRDF	Bidirectional Reflectance Distribution Function
CD-SEM	Critical Dimension – Scanning Electron Microscope (acronyme anglais du MEB)
LER	Line Edge Roughness
LPCVD	Low Pressure Chemical Vapor Deposition
LWR	Line Width Roughness
MEB	Microscope Electronique à Balayage (acronyme français du SEM)
MMFE	Modal Method of Fourier Expansion
PECVD	Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition
PSD	Power Spectral Density
RCCAL	Rousset Central Characterization Analysis Laboratory
RCWA	Rigorous Coupled Waves Analysis
RT/CD	Real Time / Critical Dimension
SEM	Scanning Electron Microscope
STD	Standard Deviation, écart-type en anglais
STM	STMicroelectronics (fusion de SGS, <i>Società Generale Semiconduttori</i> , et de <i>Thomson Semiconducteurs</i> )
SWA	Side Wall Angle
TEOS	TétraEthOxySilane, sert également par abus de langage de dénomination pour l'oxyde de silicium déposé via la dégradation du TEOS.
TIS	Total Integrated Scattering

## Résumé

L'industrie des nanotechnologies est un monde en constante évolution. Les améliorations dans les techniques de fabrication permettent de définir des composants de plus en plus petits. Afin de vérifier les dimensions fabriquées, la métrologie doit s'adapter et être capable de fournir des analyses basées sur des mesures optiques fiables et répétables.

Ces travaux se focalisent dans un premier temps sur les procédés de fabrication des échantillons. Les techniques de dépôts, de photolithographies et de gravure sont présentées. Ces techniques nécessitent des outils de métrologie adaptés permettant un contrôle en ligne. Les équipements de métrologie disponibles sont donc présentés en se focalisant sur les techniques par imagerie comme la microscopie électronique à balayage ou transmission et les techniques par inversion telle que l'ellipsométrie et la scatterométrie. Le troisième chapitre est dédié aux applications de ces techniques en production. Les empilements étudiés sont généralement constitués de couches innovantes. La dernière partie est axée sur des méthodes de caractérisation de la rugosité par diffusion lumineuse sur des réseaux périodiques.

Mots-clés : Nanotechnologie, Ellipsométrie, Scatterométrie, Rugosité, Diffusion

## Summary

Nanotechnology industry is a world in constant evolution. Improvements in manufacturing techniques are used to define smaller and smaller components. To verify dimensions, metrology has to be improved to be able to provide reliable and repeatable analysis.

This work focuses first on manufacturing process samples. Deposition techniques, photolithography and etching are introduced. These techniques require metrology tools adapted for in-line monitoring. Metrology equipments introduced in this thesis highlight the application of imaging techniques such as scanning electron microscopy or transmission and inversion techniques such as ellipsometry and scatterometry. The third chapter is dedicated to the application of these techniques to monitoring production. Thin films inspected are generally innovative layers. The last part is focused on methods for roughness characterization by light scattering on periodic gratings.

Keywords: Nanotechnology, Ellipsometry, Scatterometry, Roughness, Scattering