

Méthodologie multi-échelle : codes pour la micro-électronique

Anne HEMERYCK

LAAS-CNRS, Toulouse

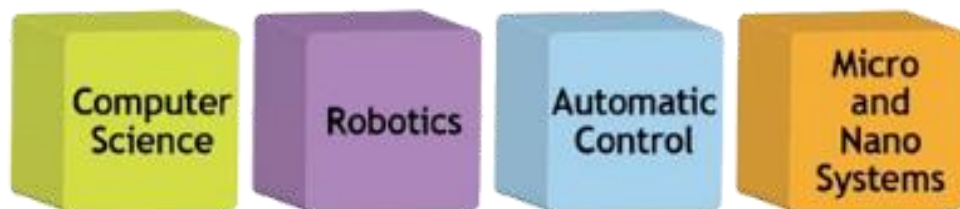
Ecole d'été du GDR MODMAT
Istres, 15-19 Juillet 2019

Le LAAS est une unité du CNRS située à Toulouse (France)



Chercheurs et enseignants chercheurs: ~ 500
 ~ 90 chercheurs CNRS
 ~ 130 Enseignants chercheurs
 ~ 40 Post-doc – 240 Doctorants

Ingénieurs, techniciens, administratifs : ~150



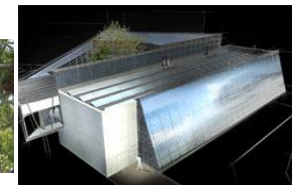
4 grands domaines de recherche et 4 axes transverses

Espace

Santé

Intelligence ambiante

Energie



Applications : Aéronautique et Espace, agriculture, défense, télécommunications, transports, environnement et développement durable, usine du futur, santé...

THALES

AIRBUS GROUP

Continental

ONCOPOLE
TOULOUSE | FRANCE

cnes
CENTRE NATIONAL D'ETUDES SPATIALES

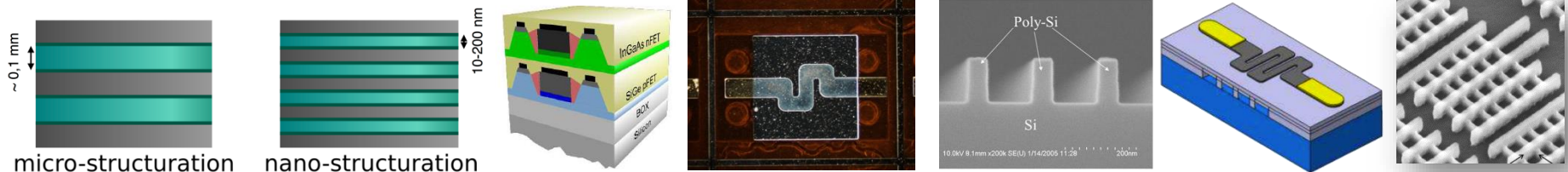
cea



Pourquoi modéliser les matériaux en microélectronique ?

- Intégration directe des composants et des matériaux
 - ✓ Progrès technologiques des procédés de fabrication et des techniques de caractérisation
 - ✓ Miniaturisation des dispositifs, Amélioration des performances (Multifonctionnalités...)
 - ✓ Architectures complexes : couches minces et nanostructurées
 - X Interfaces multiples et variées
 - X Impact des défauts

Siliciure : Contact métallique, Oxydes : RAM, Spintronique, grille etc...



Pourquoi modéliser les matériaux en microélectronique ?

- Intégration directe des composants et des matériaux
 - ✓ Progrès technologiques des procédés de fabrication et des techniques de caractérisation
 - ✓ Miniaturisation des dispositifs, Amélioration des performances (Multifonctionnalités...)
 - ✓ Architectures complexes : couches minces et nanostructurées
 - X Interfaces multiples et variées
 - X Impact des défauts

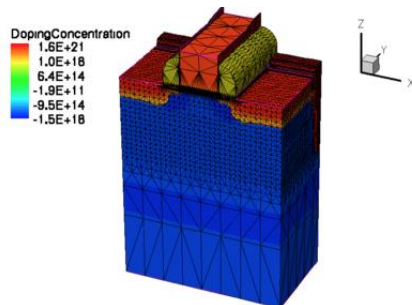
- Deux options :
 - Développement de nouveaux procédés technologiques pour améliorer le contrôle de l'élaboration des matériaux
 - Manque de connaissance : microstructure en fonction du procédé**
 - **Compréhension fondamentale** de la structure des matériaux en évolution
 - Techniques de caractérisation : *in situ*, *in operando*, *ultra vide* ...
résolution atomique → "industrialisable" ?
 - **Modélisation/simulation prédictive pour assister les technologies**

Pourquoi modéliser les matériaux en microélectronique ?

- Modélisation / simulation de l'évolution des matériaux intégrés

Technology Computer Aided Design – TCAD*

- Outils prédictifs pour remplacer tout ou partie de l'effort expérimental (nombre d'essais, temps, coûts de R&D)



Effets multiphysiques

- Echelle du composant

De nombreux outils commerciaux :

- Continu : Éléments finis, lois phénoménologiques, modèles compacts

$$\mathbf{J}_j = -\rho \mathcal{D}_{ij} \nabla c_j$$

- Simulations des différentes étapes des procédés de fabrication (épitaxie, implantation, gravure, ...), diffusion, optimisation des effets thermiques et contrainte mécanique ...

Manque de granularité à l'échelle atomique dans les outils actuels

DFT, DM, kMC : calibration des outils
TCAD commerciaux actuels et
benchmark

*Conception Assistée par Ordinateur – CAO

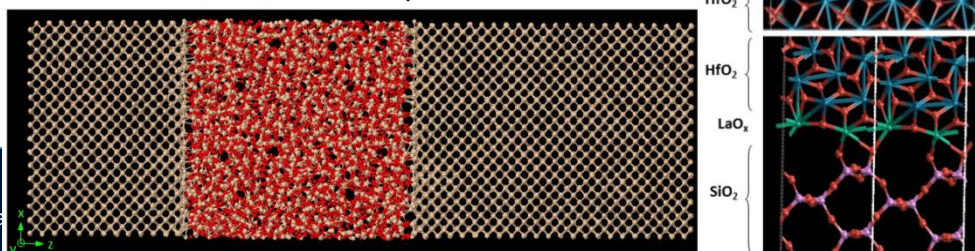
Pourquoi modéliser les matériaux en microélectronique ?

DFT, DM, kMC : calibration des outils
TCAD commerciaux actuels et
benchmark,

- Aide à la validation des hypothèses de modélisation et à la compréhension de la physique du dispositif
- Facteurs de mérite pouvant être directement comparées aux données expérimentales
- Aide à l'amélioration des modèles compact : base de données pour alimenter les modèles compacts
- Aide aux designs innovants
- Exploration des options technologiques

Cf. Samy Merabia
E. Lampin, Istres 2015

- Transport thermique (DM,...)
- Résistance thermique d'interface

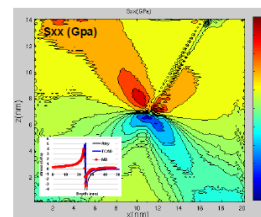


Cf. Fabienne Ribeiro

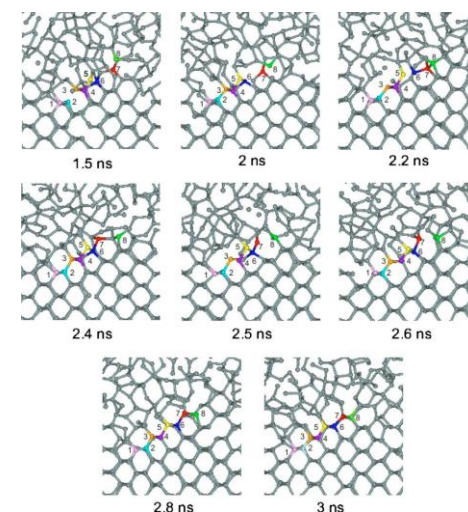
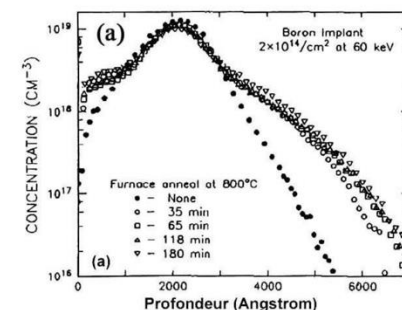
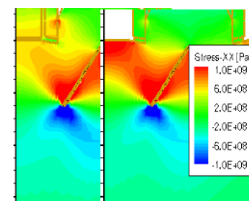
Diffusion des dopants (DFT)

Calcul de contraintes

- DM



- TCAD



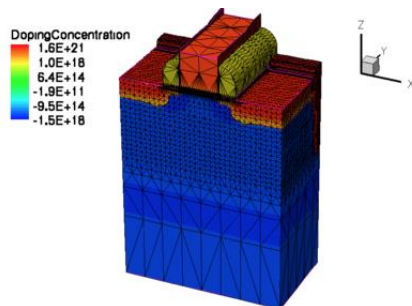
Front de
recristallisation (DM)

Pourquoi modéliser les matériaux en microélectronique ?

- Modélisation / simulation de l'évolution des matériaux intégrés

Technology Computer Aided Design – TCAD*

- Outils prédictifs pour remplacer tout ou partie de l'effort expérimental (nombre d'essais, temps, coûts de R&D)



Effets multiphysiques

- Echelle du composant

De nombreux outils commerciaux :

- Continu : Éléments finis, lois phénoménologiques, modèles compacts

$$\mathbf{J}_j = -\rho \mathbf{D}_{ij} \nabla c_j$$

- Simulations des différentes étapes des procédés de fabrication (épitaxie, implantation, gravure, ...), diffusion, optimisation des effets thermiques et contrainte mécanique ...

Manque de granularité à l'échelle atomique dans les outils actuels

DFT, DM, kMC : calibration des outils TCAD commerciaux actuels et benchmark - Diffusion des dopants (DFT), front de recristallisation (DM)...

Nouveaux outils TCAD dotés d'une résolution atomistique

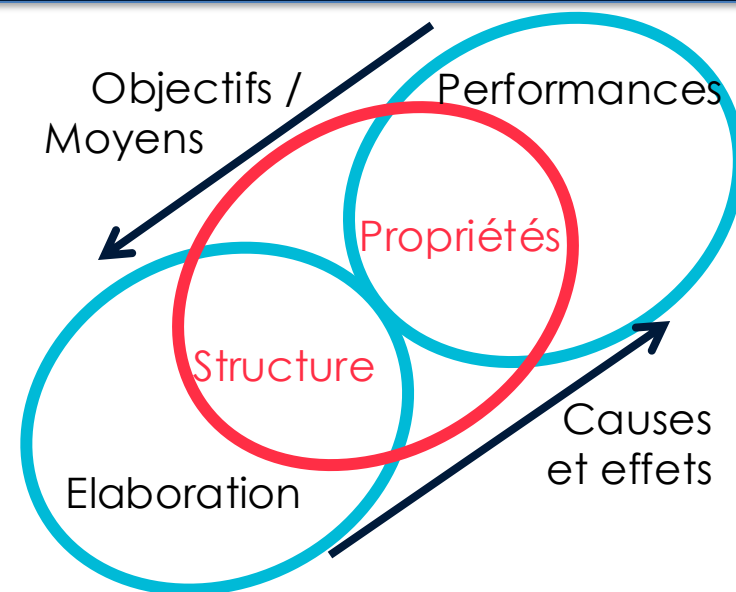
> Etablir le lien entre la microstructure des matériaux et leurs propriétés macroscopiques

*Conception Assistée par Ordinateur – CAO

Comment modéliser les matériaux en microélectronique ?

> Des matériaux « réalistes » dans leur environnement dans le contexte de la microélectronique

- Diversité des procédés : oxydation, phase vapeur, implantation ...
- Matériau : oxydes, métaux, semiconducteurs, multimatériaux, hétérogénéité...
- Sollicitations extérieures : température, corrosion, atmosphère, irradiations...



Intégration des matériaux,
simulation de la croissance

Nanostructuration, défauts

Environnement : paramètres procédé

Matériaux en fonctionnement

Intégrité, réactivité

Environnement : atmosphère gazeuse, humidité, milieu liquide

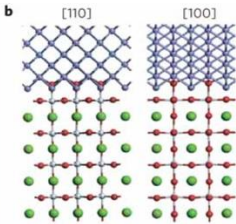
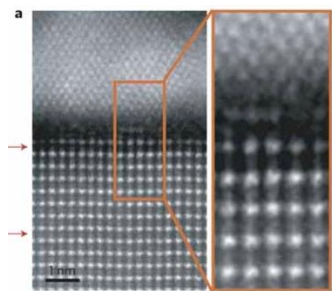
Matériaux en milieu agressif ou extrême

Fiabilité, obsolescence

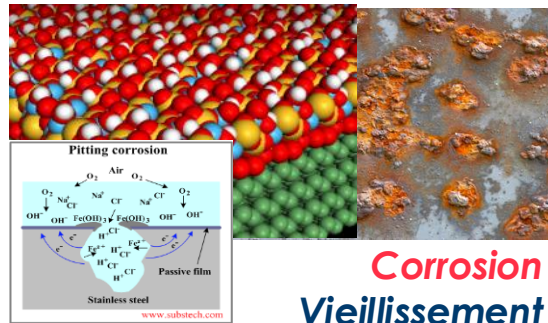
Environnement : radiatif

Comment modéliser les matériaux en microélectronique ?

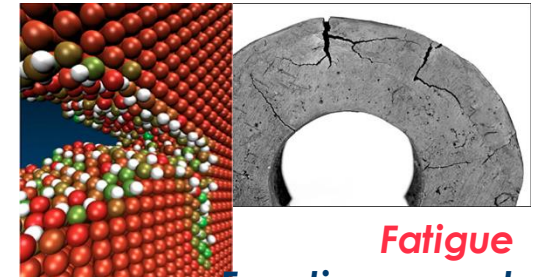
- Deux questions se posent :
 - Lien entre la microstructure et les propriétés macroscopiques ?
 - Evolution temporelle de la microstructure et les conséquences sur les fonctionnalités ?



**Nanostructure
Elaboration**



**Corrosion
Vieillessement**



**Fatigue
Fonctionnement**

➤ Diffusion atomique



Echelle de temps

- Etre représentatif des échelles pertinentes et caractéristiques du mécanisme ?
- Trouver les événements rares !

Surface d'Energie Potentielle (SEP)

- Bonne connaissance du paysage énergétique
- Dépendance à l'environnement

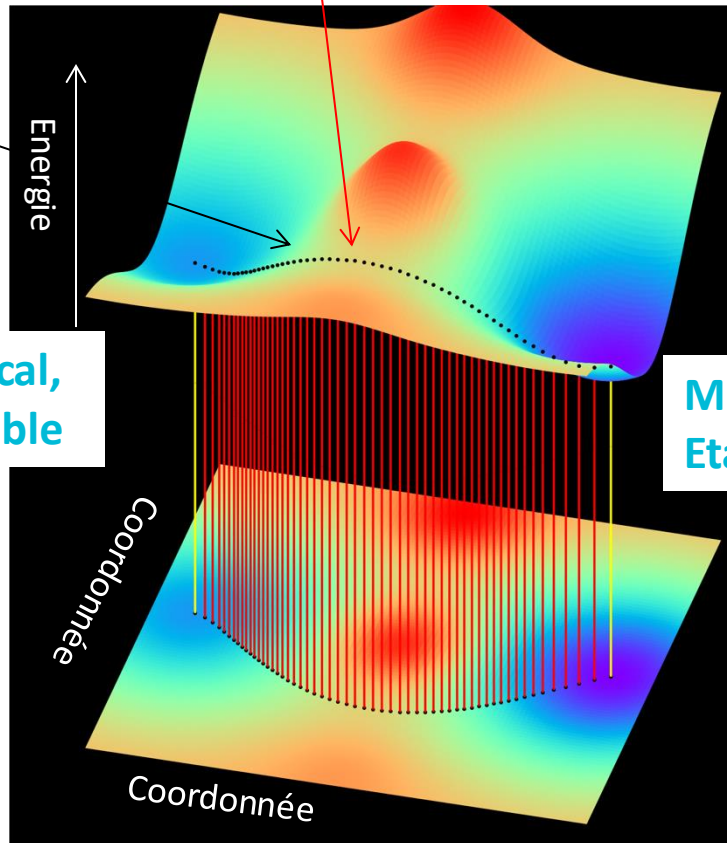
Comment modéliser les matériaux en microélectronique ?

Etats de transition
Barrière d'activation

Cf. Normand Mousseau

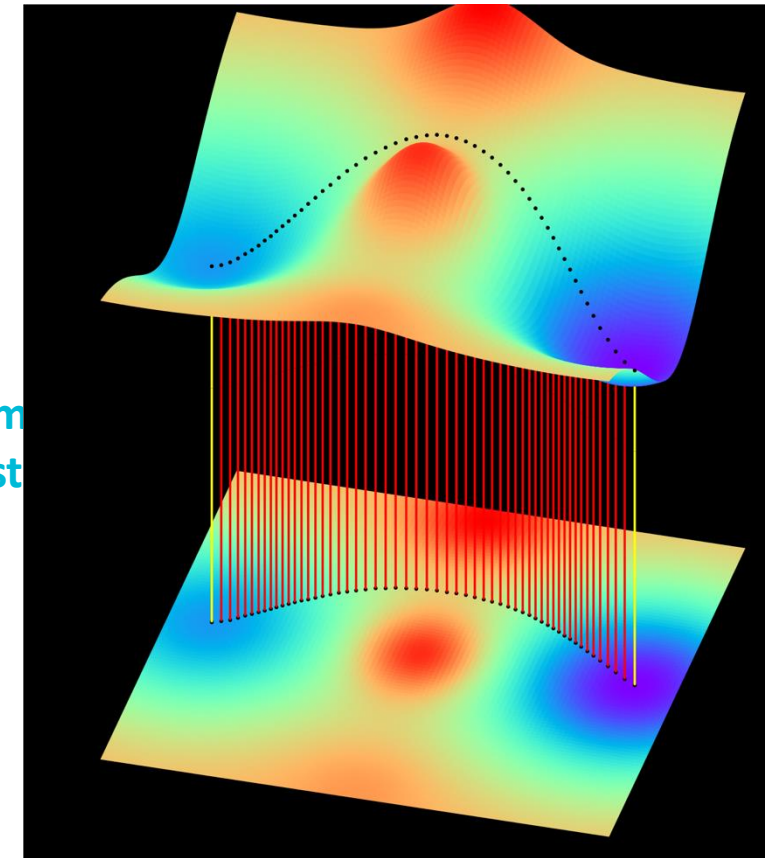
Chemin de diffusion,
Chemin d'énergie
minimale

Minimum local,
Etat métastable



©Antoine Jay

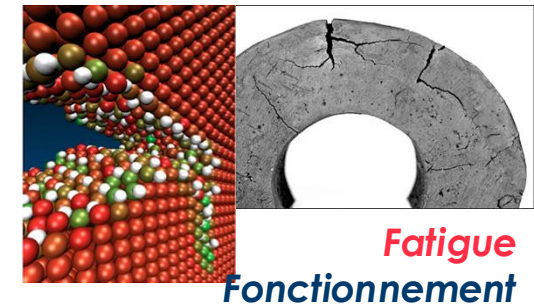
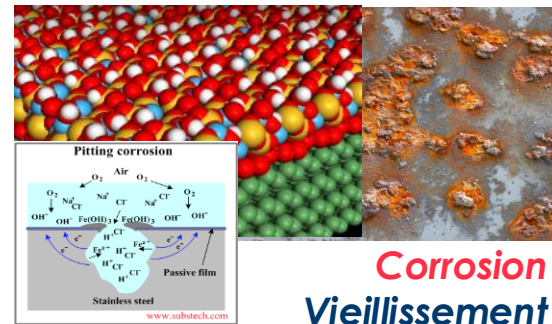
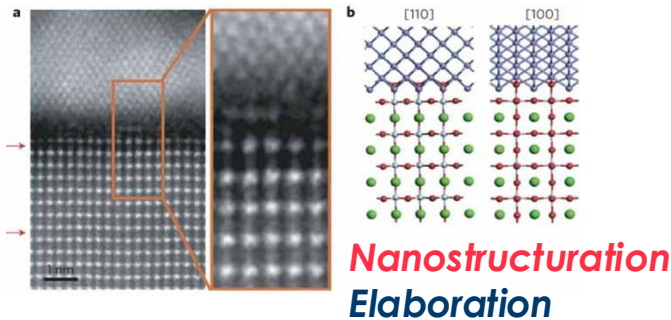
Minimum
Etat stable



- Etats de transition sont par nature évanescents, non observables mais cruciaux !
- SEP est définie pour un état donné, pour un temps donné dans un environnement local donné

Comment modéliser les matériaux en microélectronique ?

- Deux questions se posent :
 - Lien entre la microstructure et les propriétés macroscopiques ?
 - Evolution temporelle de la microstructure et les conséquences sur les fonctionnalités ?



➤ Diffusion atomique



Echelle de temps

- Etre représentatif des échelles pertinentes et caractéristiques du mécanisme ?
- Trouver les événements rares !

Surface d'Energie Potentielle (SEP)

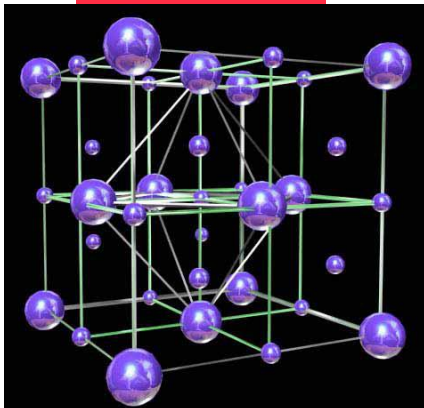
- Bonne connaissance du paysage énergétique
- Dépendance à l'environnement

➤ Approche de modélisation multi-niveaux

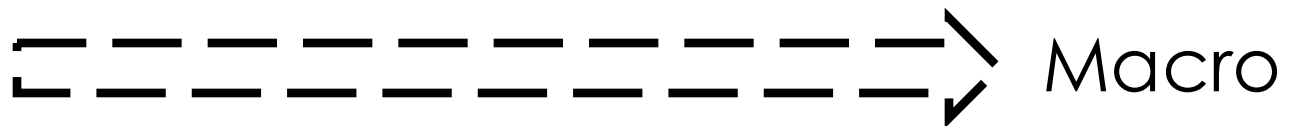
Comment modéliser les matériaux en microélectronique ?

- > Objectifs / Cahier des Charges
 - Comprendre le comportement des matériaux et suivre leur évolution dans le temps
- > Recours aux méthodes cinétiques atomistiques ?
 - Limites des outils de type *ab initio* : taille & temps, coûteux en ressources
 - **Etablir le lien entre la structure atomique et les observations macroscopiques**

SOUHAIT



BESOIN



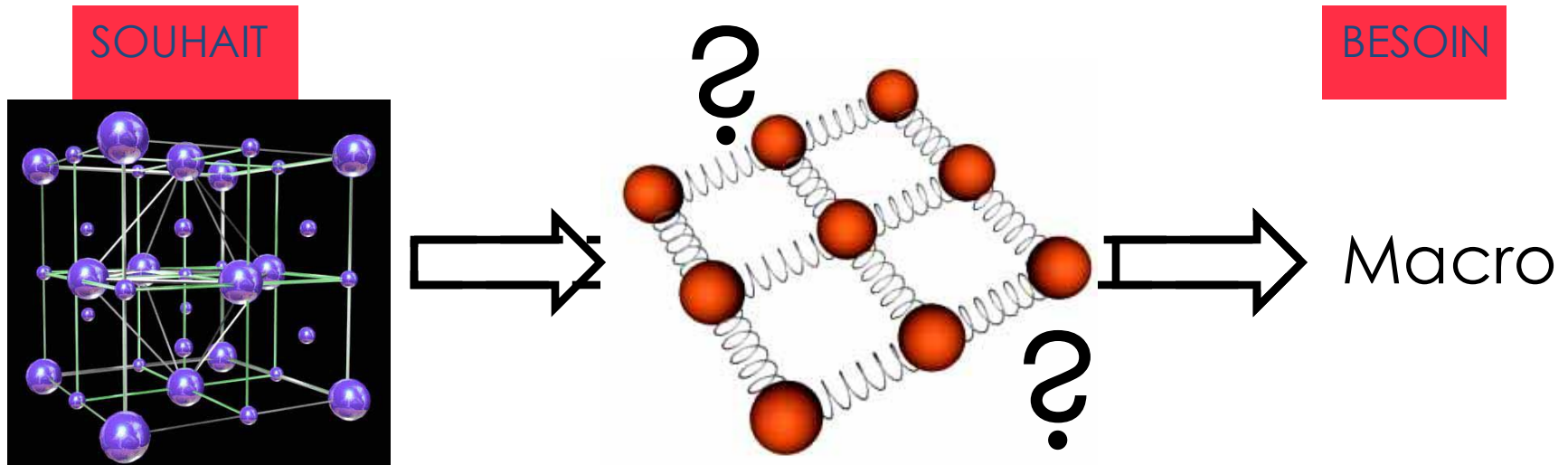
Comment modéliser les matériaux en microélectronique ?

> Objectifs / Cahier des Charges

- Comprendre le comportement des matériaux et suivre leur évolution dans le temps

> Recours aux méthodes cinétiques atomistiques ?

- Limites des outils de type *ab initio* : taille & temps, coûteux en ressources
- **Etablir le lien entre la structure atomique et les observations macroscopiques**
- Accès à techniques de simulation pour des « grands systèmes » en terme de taille et des temps « plus longs »



> Objectifs / Cahier des Charges

- Comprendre le comportement des matériaux et suivre leur évolution dans le temps

> Recours aux méthodes cinétiques atomistiques ?

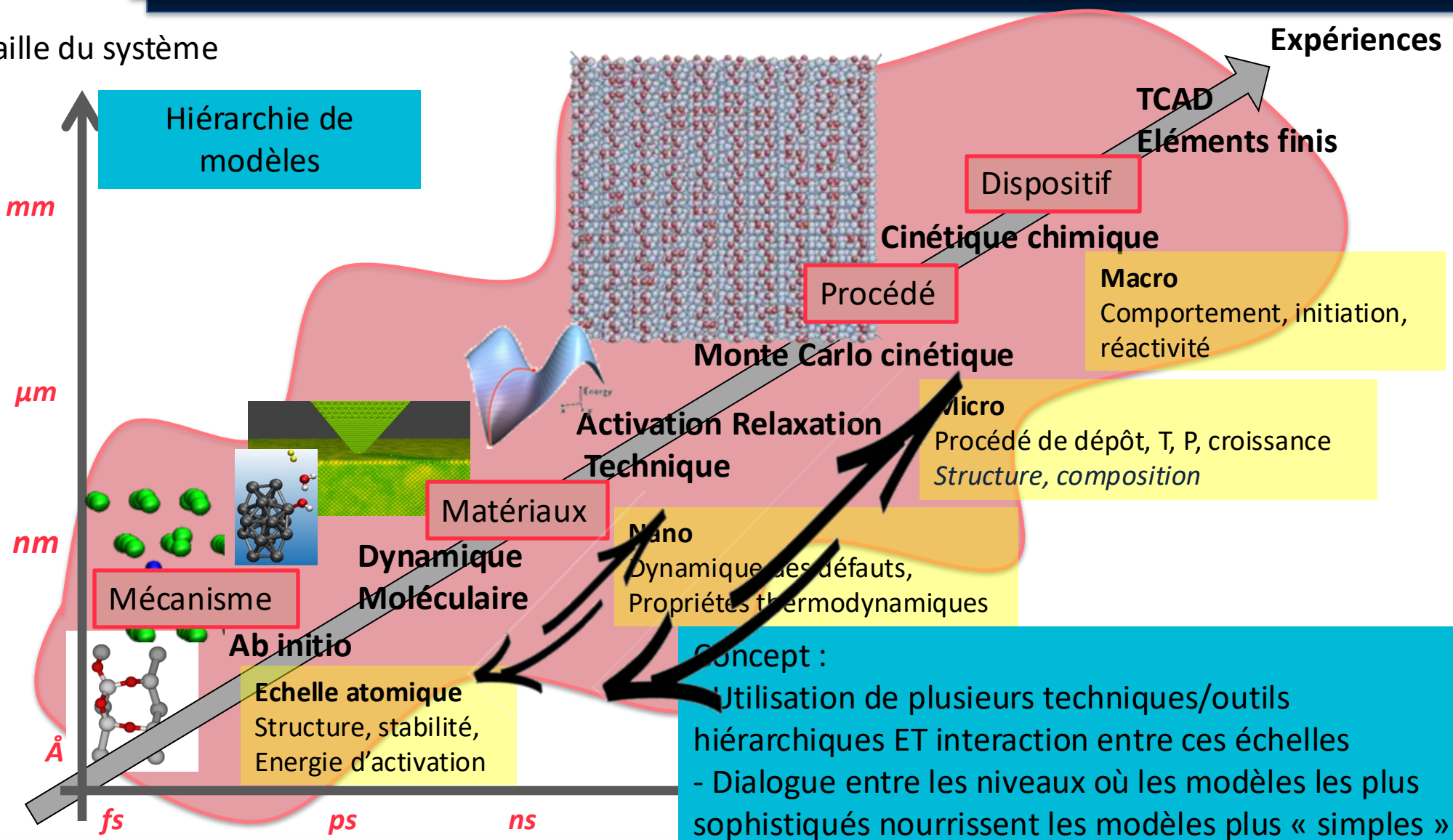
- Limites des outils de type *ab initio* : taille & temps, coûteux en ressources
- **Etablir le lien entre la structure atomique et les observations macroscopiques**
- Accès à techniques de simulation pour des « grands systèmes » en terme de taille et des temps « plus longs »

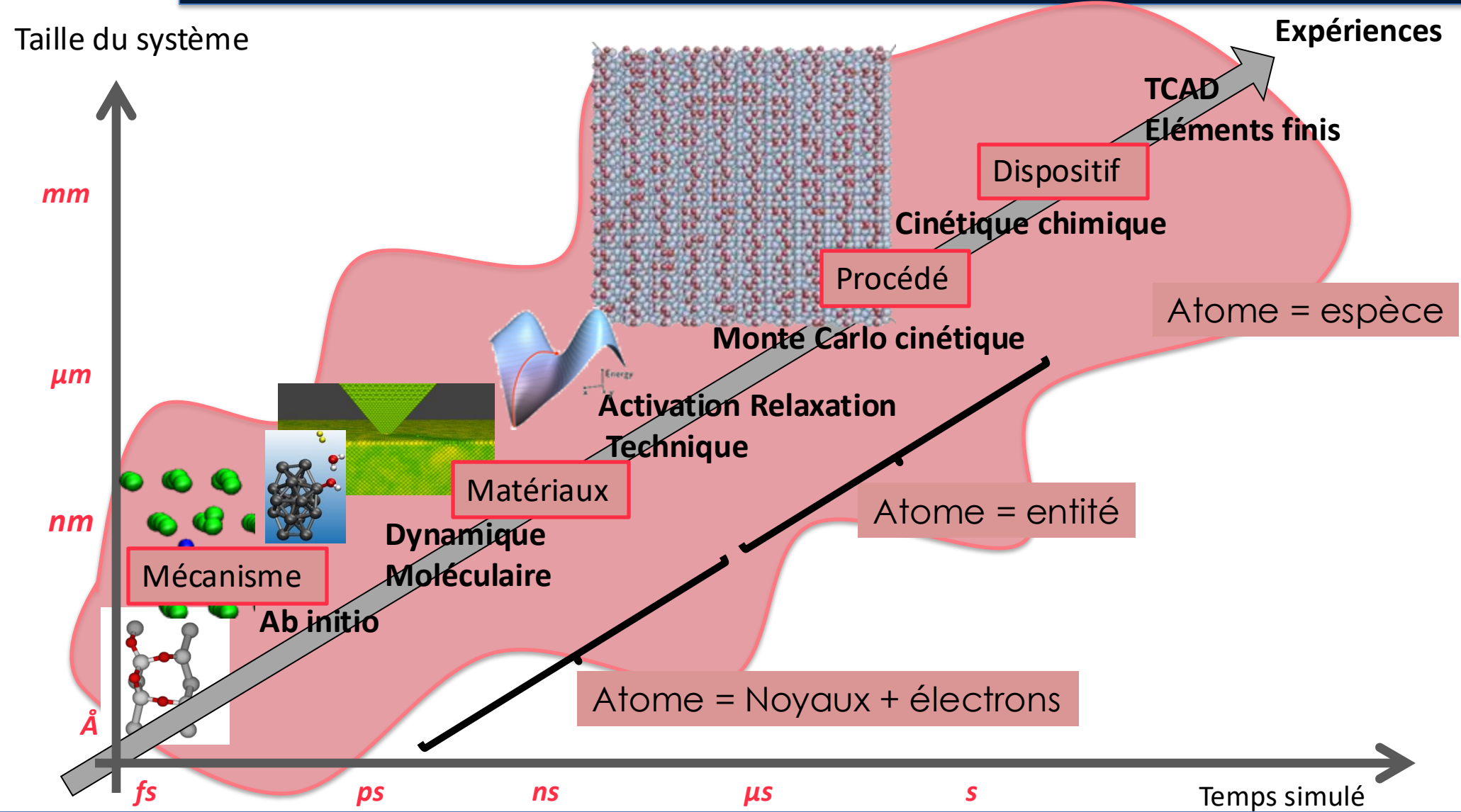
> Quelle méthode pour quel matériau / mécanisme / phénomène ?

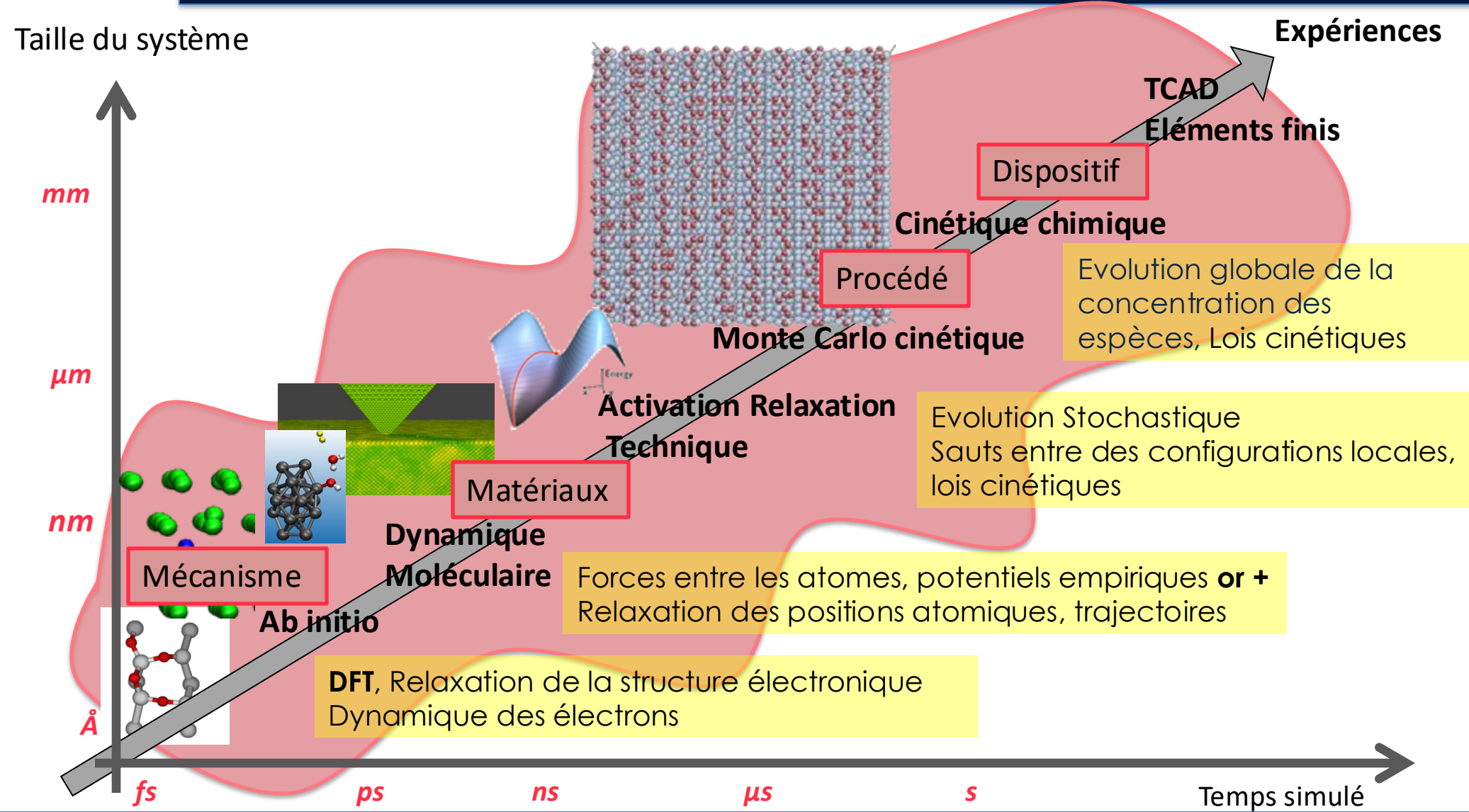
- Se poser la bonne question
 - Quel problème souhaitons nous cibler ?
 - Que voulons nous voir ?
 - Que voulons nous simuler ?
 - Et avec quelle précision ? ...

➤ **Savoir faire des choix** (que veut on voir ? quelle propriété ?)
des compromis (quelle précision ? taille, temps simulés ciblés ?)

Taille du système







En application ... Ca donne quoi ?

Intégration des
matériaux,
simulation de la
croissance

Nanostructuration, défauts

Environnement : paramètres procédé

Matériaux en
fonctionnement

Intégrité, réactivité

*Environnement : atmosphère gazeuse,
humidité, milieu liquide*

Matériaux en milieu
agressif ou extrême

Fiabilité, obsolescence

Environnement : radiatif

*Utilisation d'une hiérarchie
d'outils, de méthodologies*

Application I. Effets des irradiations (cascades de déplacements atomiques) dans les composants embarqués (ici le silicium) sur les propriétés électroniques

Application II. Matériaux multicouches énergétiques : Réactivité et effets des paramètres procédés

*Construction d'outils de
simulation numérique*



Sortie Baux de Provence

Ecole d'été
Istres 2019

Coll. CEA-DAM, ISAE
CNR Trieste, Univ Montréal

*Contributeurs à cette présentation de
gauche à droite :*

Gabriela HERRERO SABOYA

Antoine JAY

Thomas JARRIN

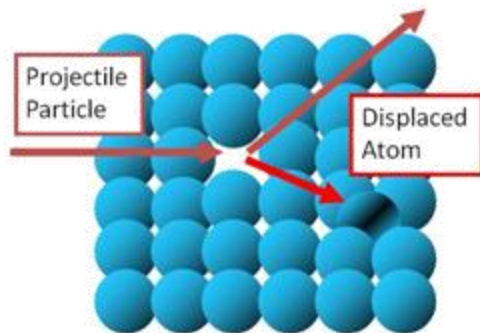
■ Dose de déplacements

Photons, protons, neutrons, ions...



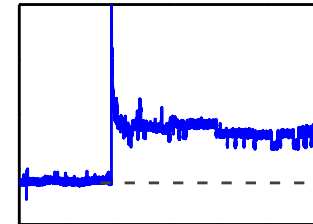
■ Déplacements atomiques

→ Création de défauts et de cascades



■ Modification du fonctionnement

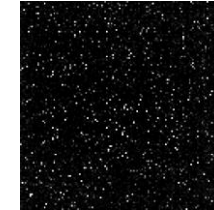
Capteur d'image : Augmentation du courant d'obscurité (niveau de bruit mesuré en l'absence de stimulation extérieure)



Avant irradiation



Après irradiation



Chaque point blanc = pixel avec déplacement atomique

- > Introduction de niveaux d'énergie dans la bande interdite du semi-conducteur
- > Altération des propriétés électroniques

Application I. Effets des irradiations (cascades de déplacements atomiques) dans les composants embarqués (ici le silicium) sur les propriétés électroniques

> Différents mécanismes physiques entrent en jeu sur des échelles de temps différentes

- Collision $\rightarrow$ fs
- Cascade : balistique $\rightarrow$ ps, ns
- Mécanismes thermiquement activés $\rightarrow$ ms, ..., h, d

Simulation

Monte Carlo (MC)
Molecular Dynamics (MD)

Déplacement
Atomique



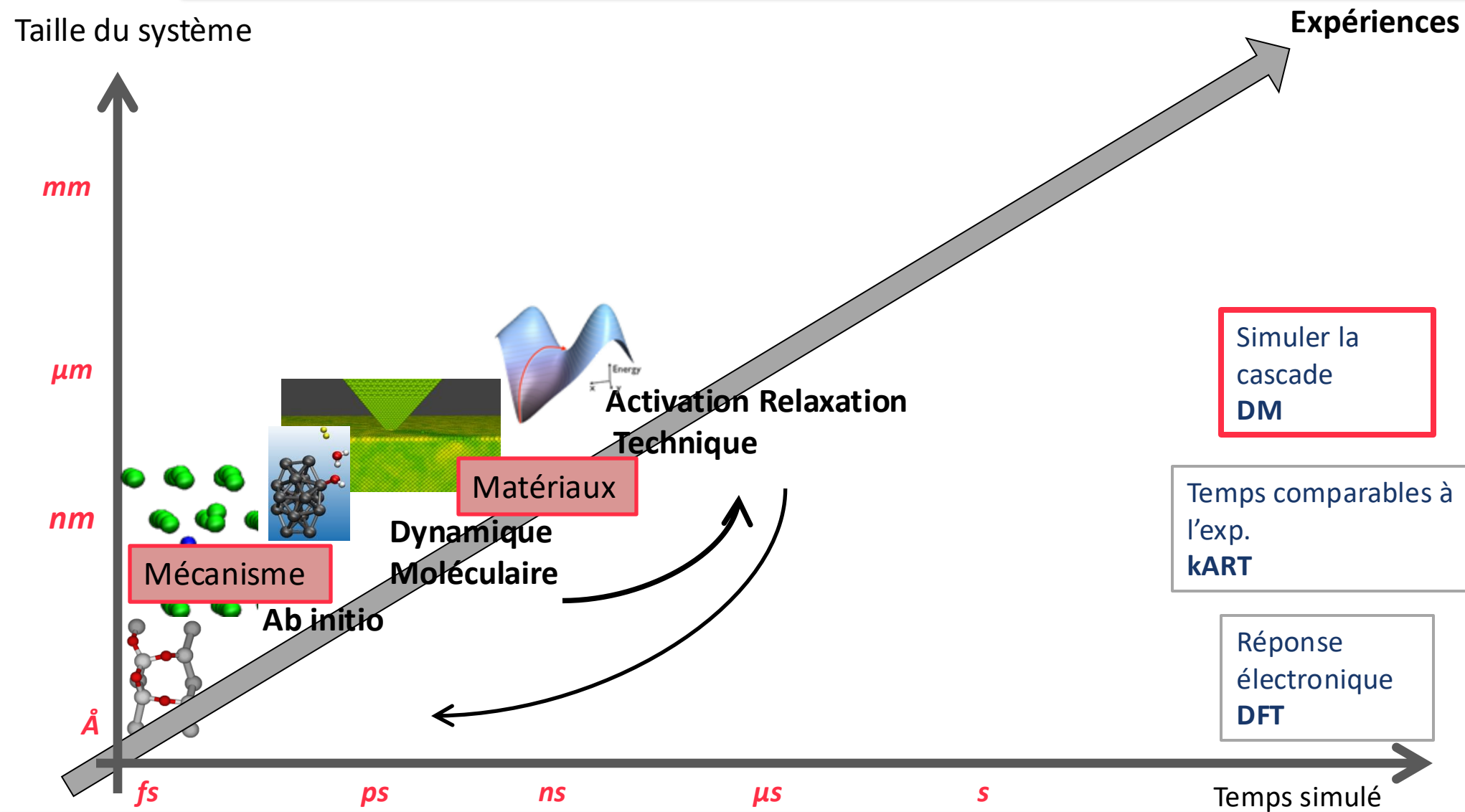
...

Expériences

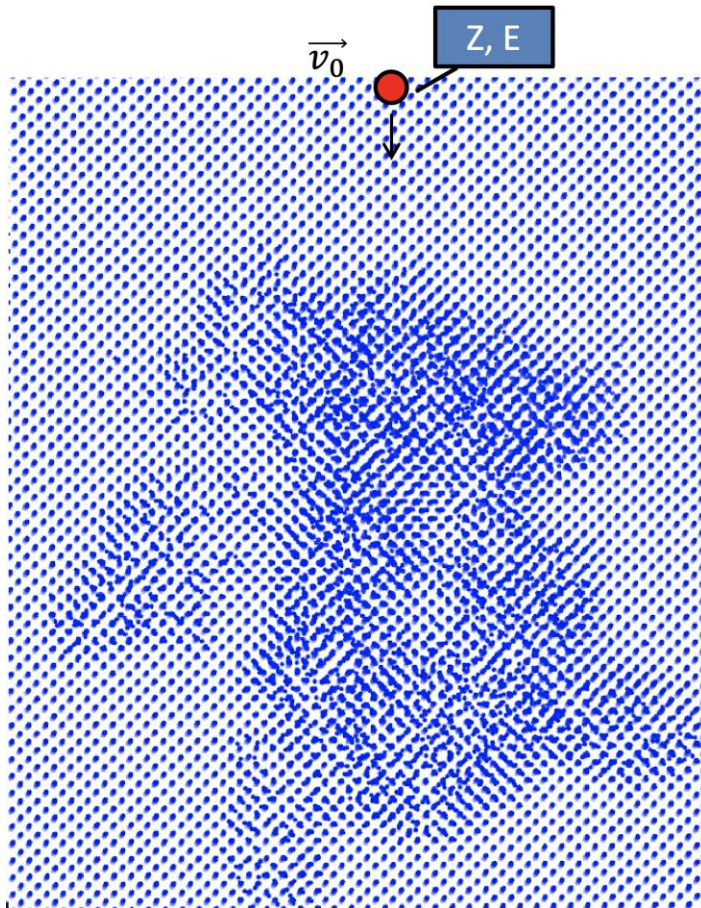
Data on electronic devices



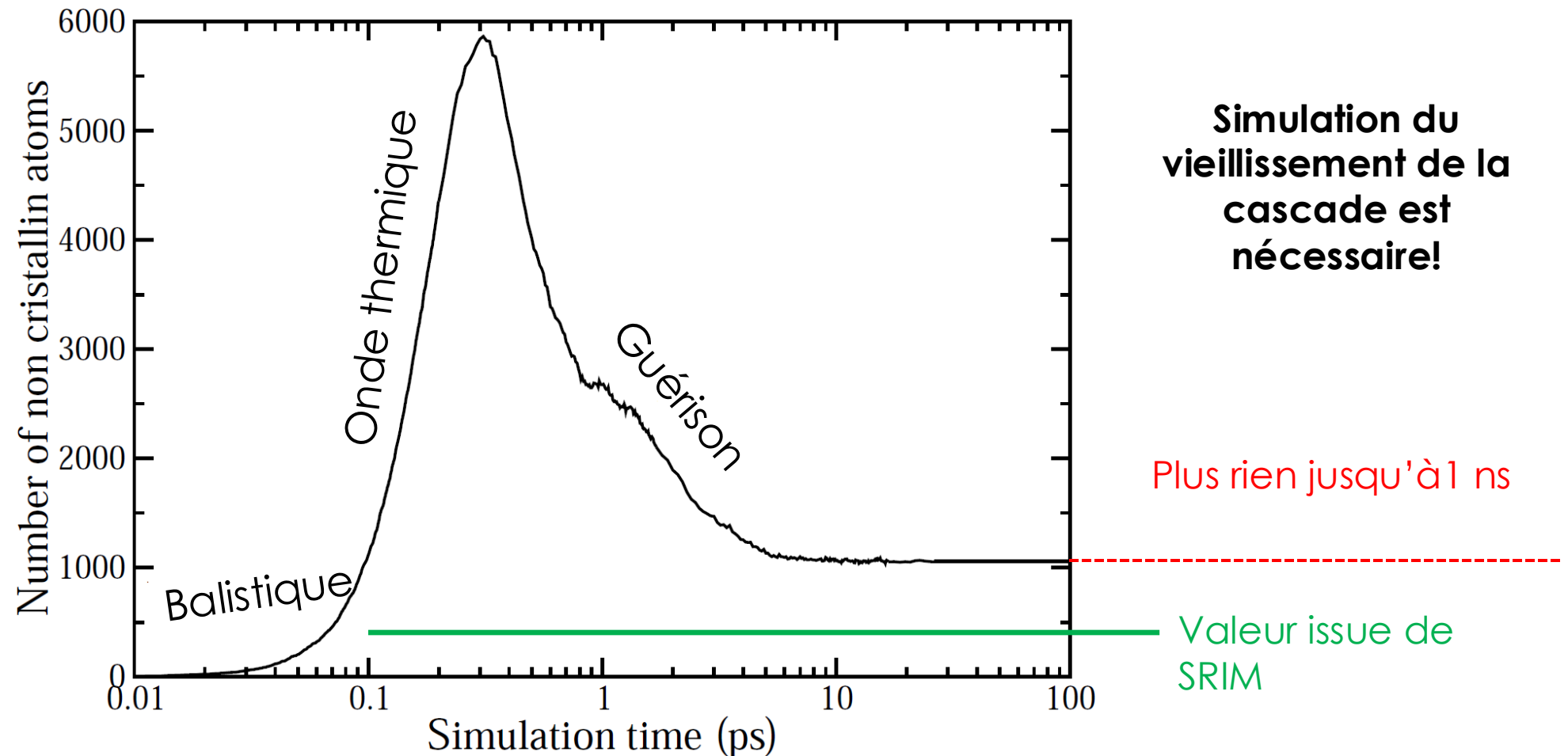
- **Challenge** : Mettre en place une approche méthodologique permettant d'étudier les phénomènes qui se produisent à l'échelle atomique mais comparables à des temps expérimentaux



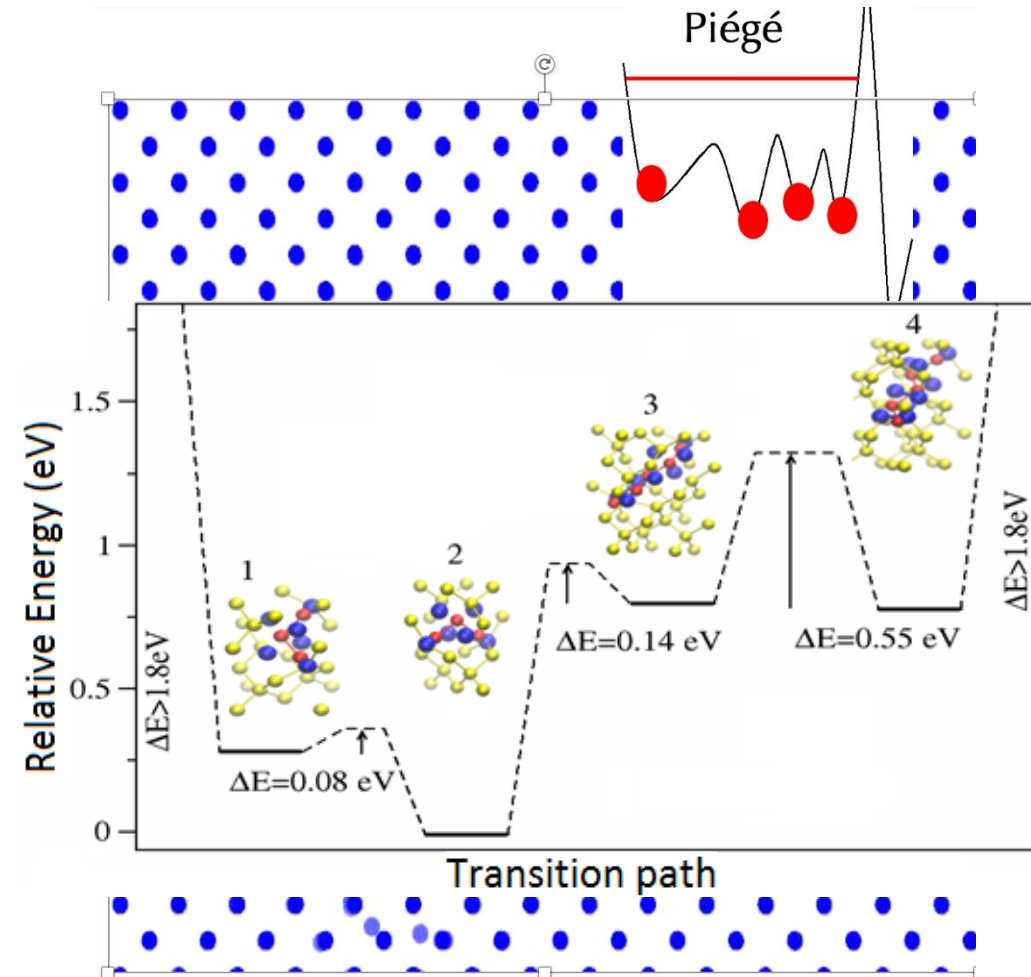
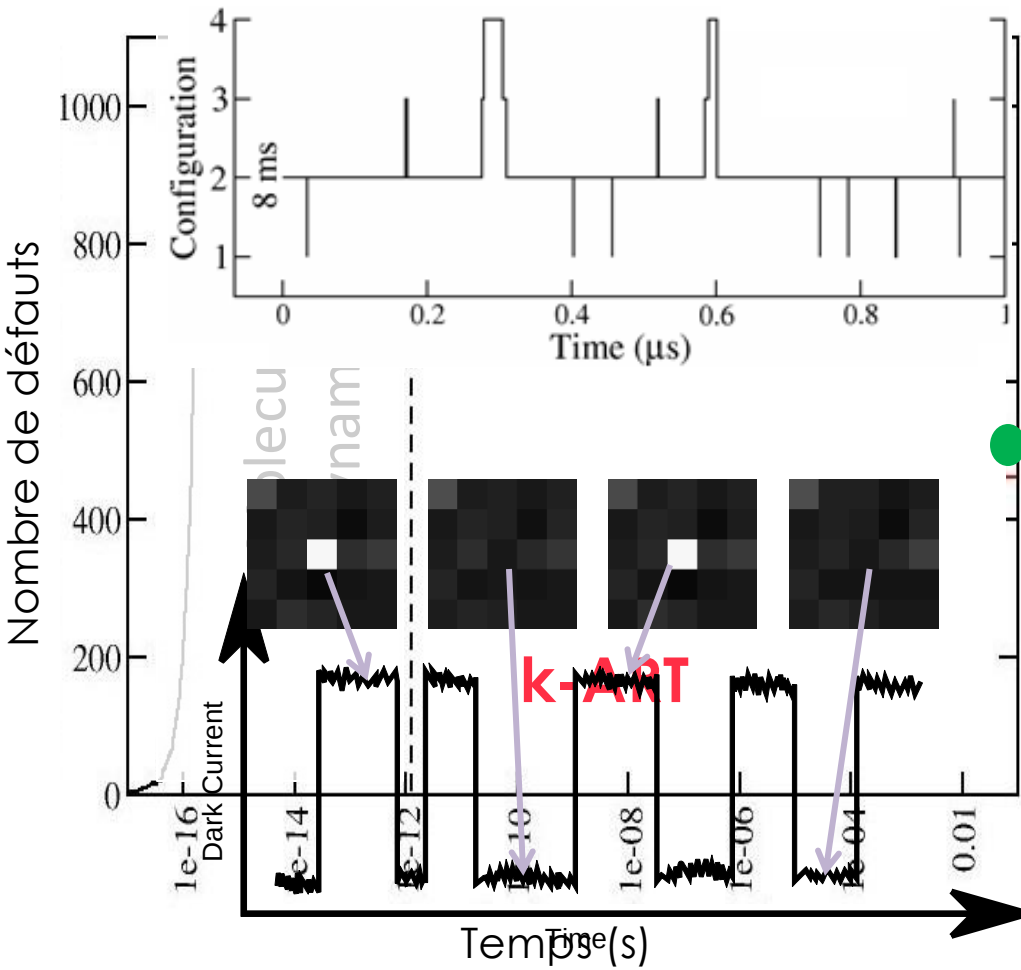
- Simulation de la cascade de déplacements : DM, SW, TTM



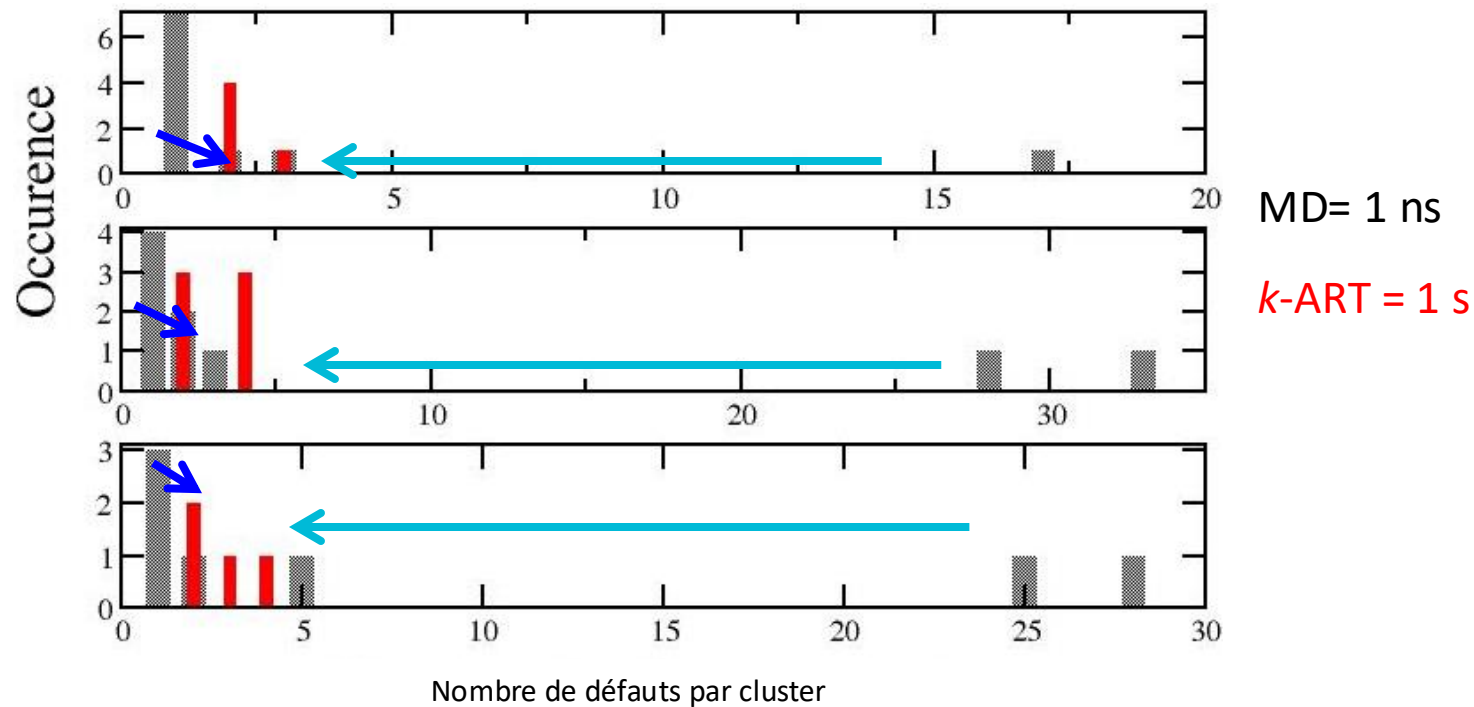
> Limite de la dynamique moléculaire



> Guérison d'un cluster de défauts avec kART



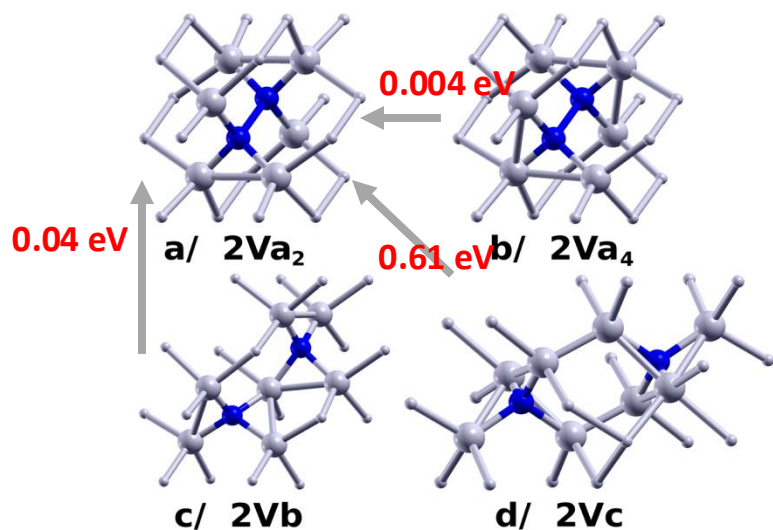
- Vieillessement de la cascade issue de la DM : kART



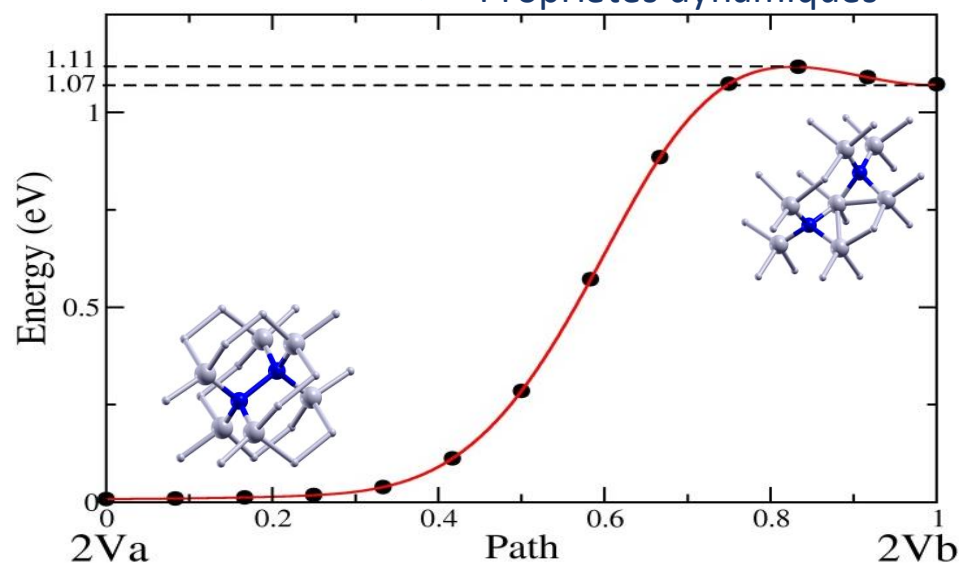
- Clusters : Recristallisation quasi-totale
- Défauts simples V, I, 2I : Agglomération ou recombinaison I+V
- 2V, 3V, 4V, 3I, 4I

Le défaut de type Bilacune 2V – DFT dans l'approximation GW

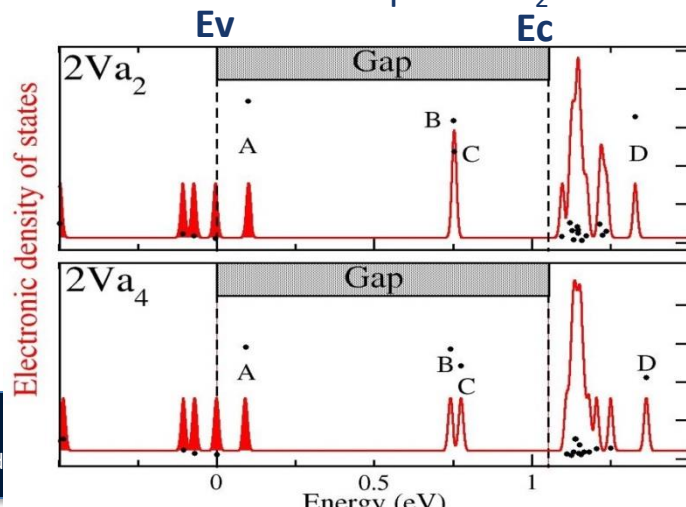
> 4 configurations



> Propriétés dynamiques



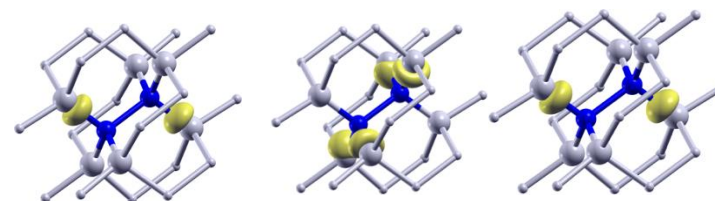
> Niveaux électroniques 2Va₂



Etat A

Etat B

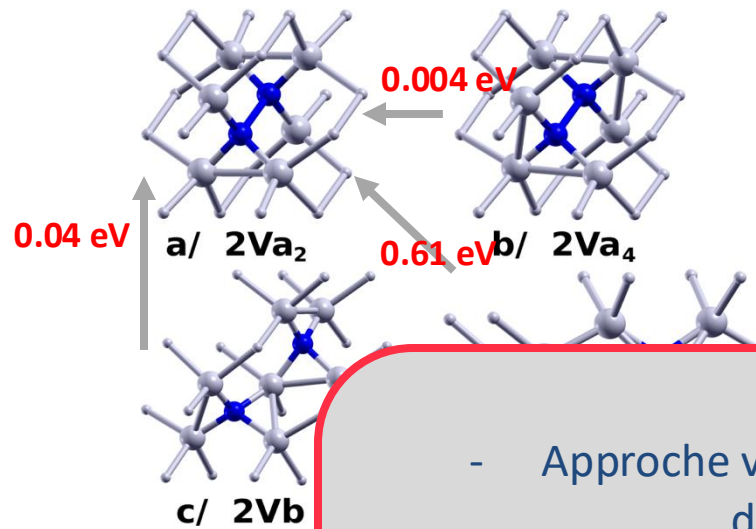
Etat C



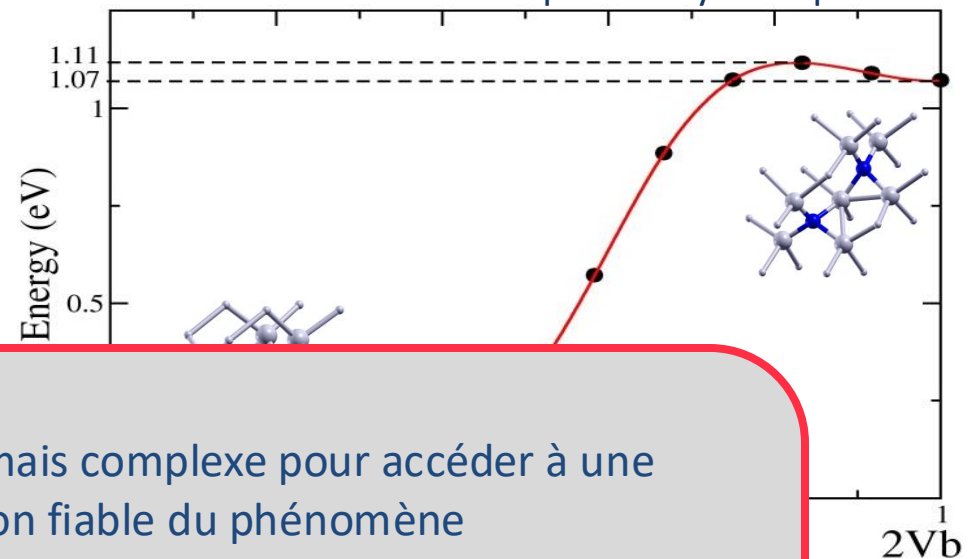
	Energy levels (eV)	E _a (eV)
2Va ₂	A : 0,10 B : 0,75 C : 0,75	0,65

Le défaut de type Bilacune 2V – DFT dans l'approximation GW

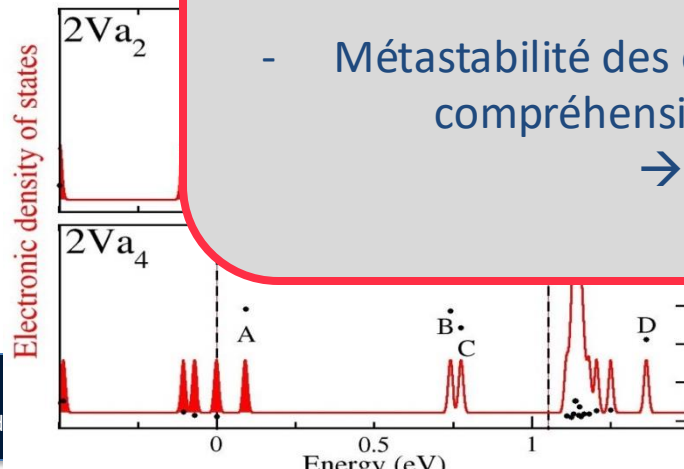
> 4 configurations



> Propriétés dynamiques



> Niveau



- Approche validée mais complexe pour accéder à une description fiable du phénomène
(Représentatif des échelles de temps)

- Métastabilité des configurations est le paramètre clé dans la compréhension des observations macroscopiques
→ Exploration de la SEP !

2Va₂

A : 0,10

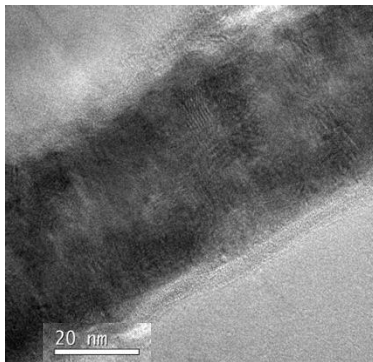
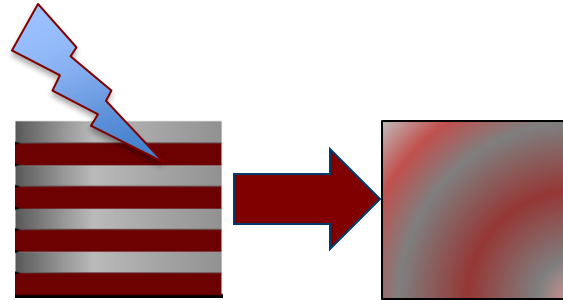
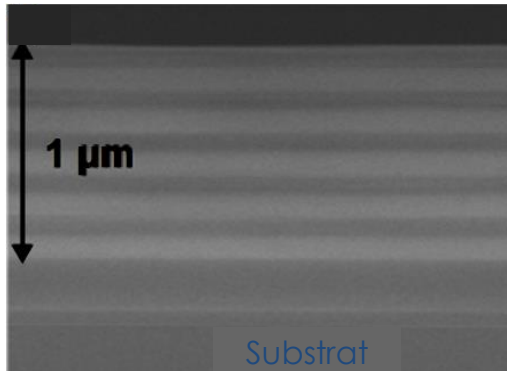
B : 0,75

C : 0,75

0,65

Matériaux énergétiques multicouches : Quésako ?

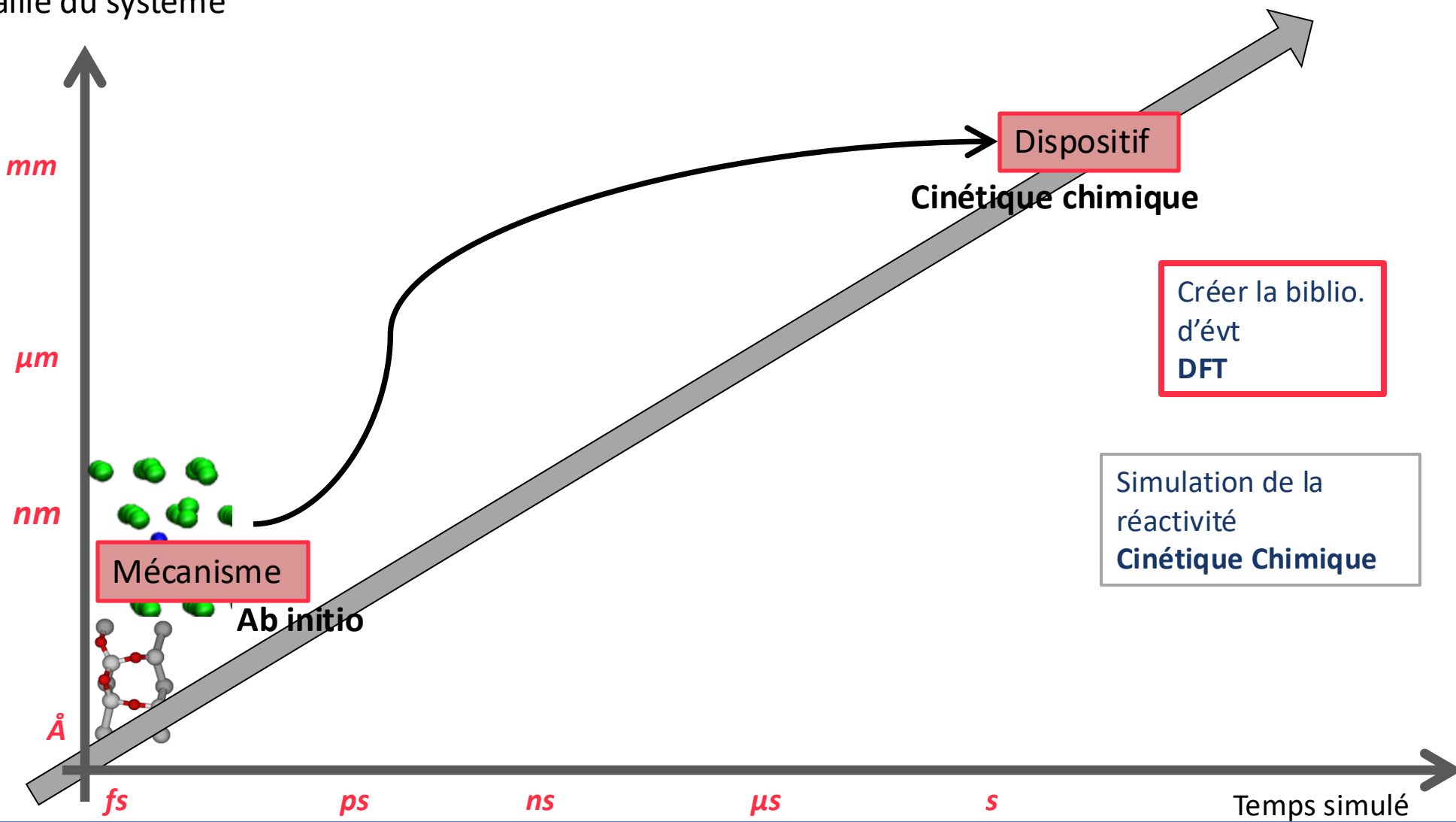
- Des matériaux énergétiques nanostructurés
 - Couples énergétiques bimétalliques (Al/Ni), thermites (Al/CuO)**



- La réactivité dépend de la proximité des réactifs
- Comprendre et prédire la réactivité du matériau
 - Modéliser le comportement thermique du matériau
 - Modèle d'initiation

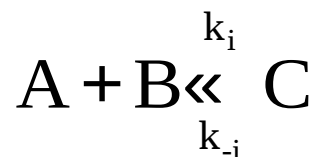
Cas d'étude AlNi

Taille du système



- > La cinétique chimique étudie la vitesse avec laquelle une **réaction chimique** s'effectue → **fonction du temps**
- > Elle se fonde sur le suivi temporel de la disparition d'un réactif et de la formation d'un produit
 - Savoir définir la vitesse de réaction et la relier aux vitesses de disparition et de formation des différentes espèces

Soit la réaction



Variation des espèces

$$\frac{-d[A]}{dt} = \frac{-d[B]}{dt} = \frac{d[C]}{dt}$$

Vitesse de réaction

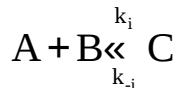
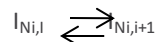
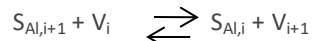
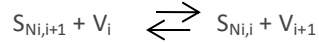
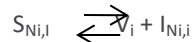
$$= k_i \times [A] \times [B] - k_{-i} \times [C]$$

« Identification des diffusions » : créer la bibliothèque d'événements

$$k_i = \frac{k_B T}{h} \times \exp\left(\frac{-DE_i}{k_B T}\right)$$

➤ Modélisation du comportement thermique

Calculs DFT :
4 espèces &
6 réactions



$$\frac{-d[A]}{dt} = \frac{-d[B]}{dt} = \frac{d[C]}{dt}$$

$$= k_i \times [A] \times [B] - k_{-i} \times [C]$$

$$k_i = \frac{k_B T}{h} \times \exp\left(\frac{-DE_i}{k_B T}\right)$$

- ◆ Modèle Macroscopique 1D
selon les lois de la cinétique
chimique

Partie cinétique

- ◆ Dépendance de
l'environnement

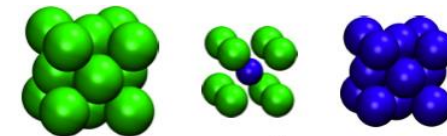
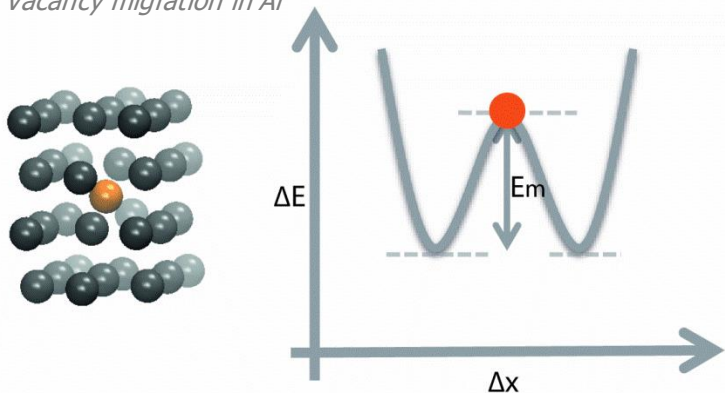
Partie énergétique

- ◆ La formation d'alliage libère
de l'énergie transformée en
augmentation de T

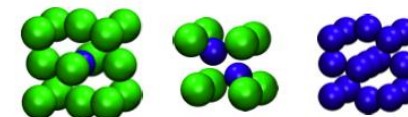
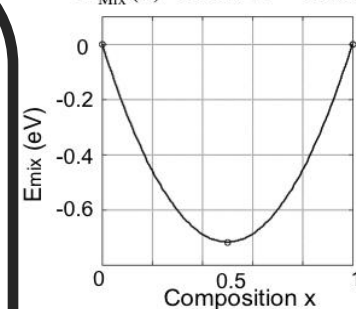
Partie thermique

$$DT = \frac{-DE - dt \times (P_{rad} + P_{conv})}{3k_b \times \sum_i (n_i (L_{Al}) + n_i (L_{Ni}) + n_i (I_{Ni}))}$$

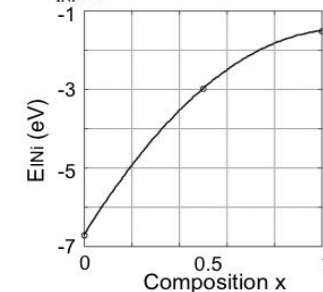
Vacancy migration in Al



$$E_{Mix}(x) = 2.865 x^2 - 2.865 x$$

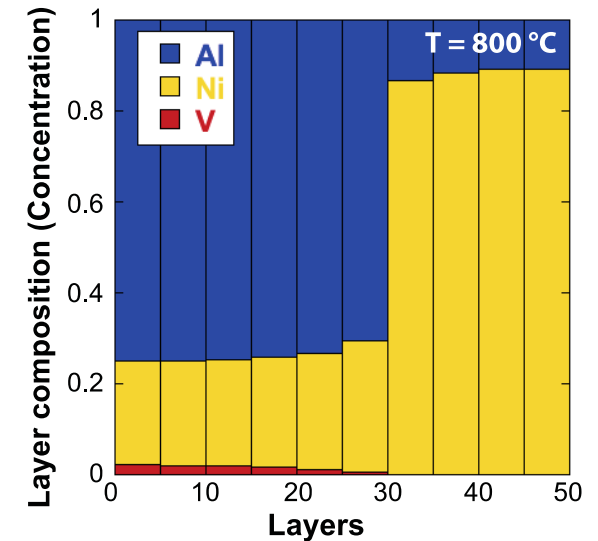
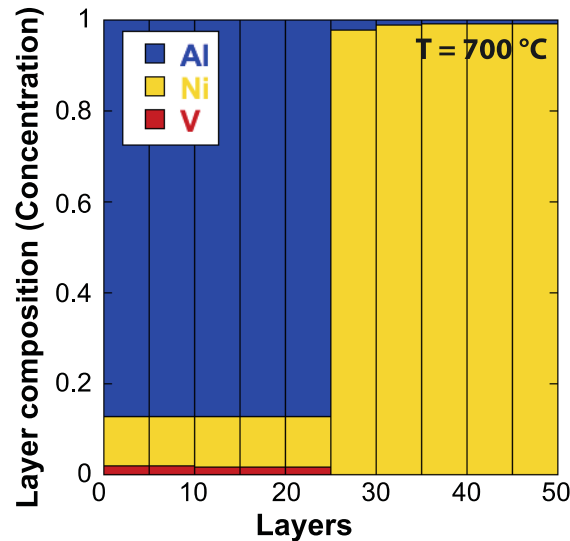
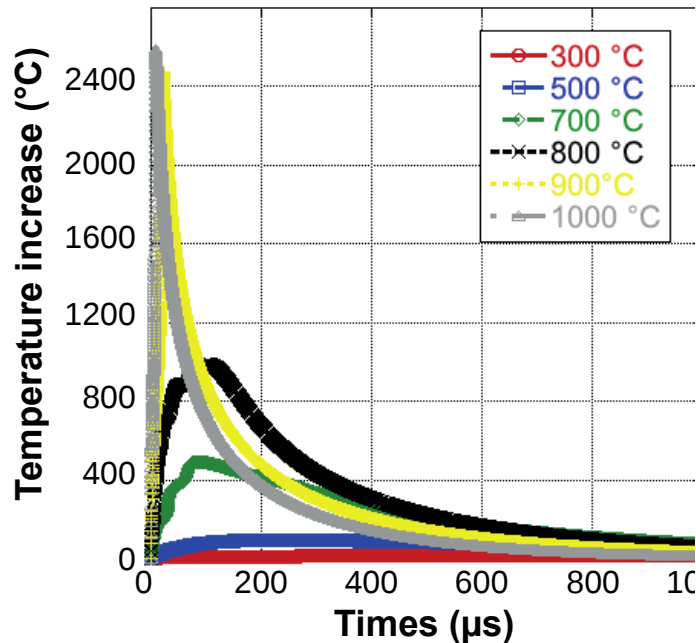


$$E_{INI}(x) = -4.506 x^2 + 9.706 x - 6.709$$



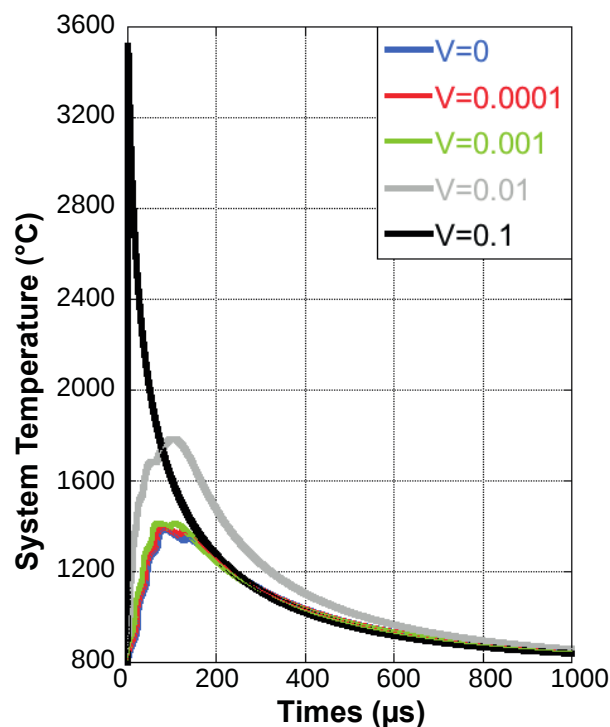
Cas d'un 'dépôt idéal' ?

Stimulus : Gradient de T

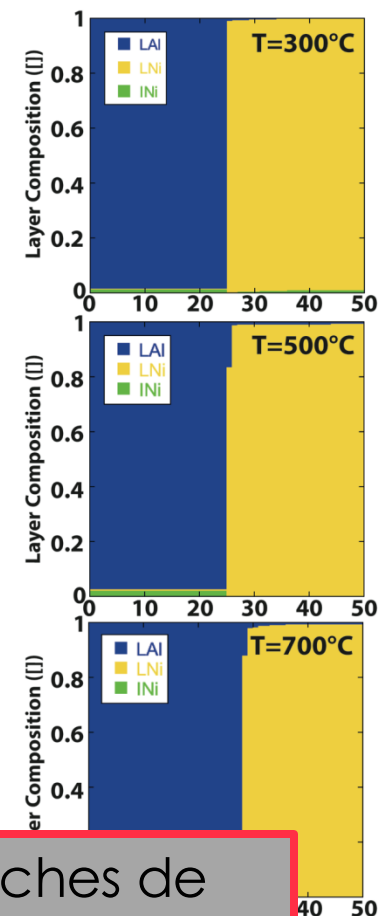
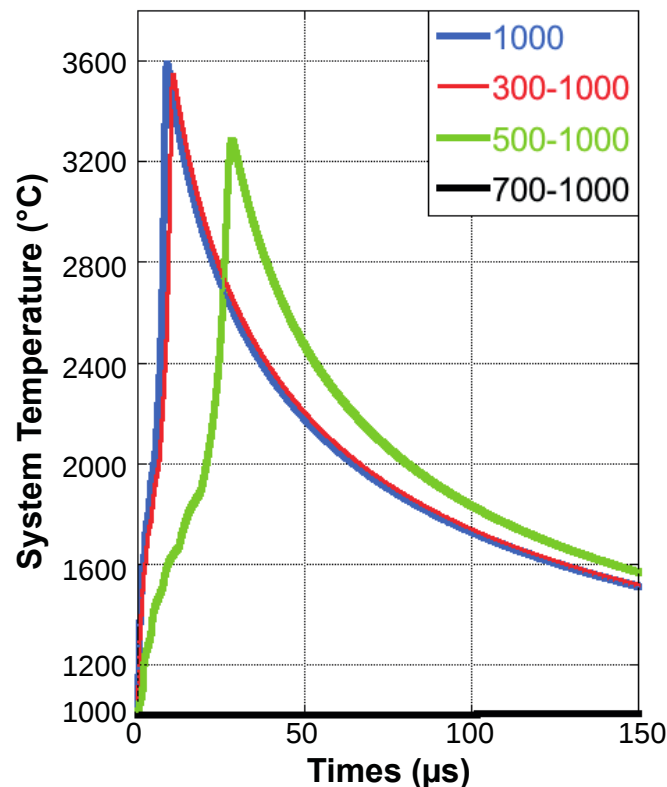


➡ Simulations ne reproduisent pas les tendances expérimentales

Influence des défauts comme une conséquence du procédé de dépôt ?



Influence du vieillissement ?

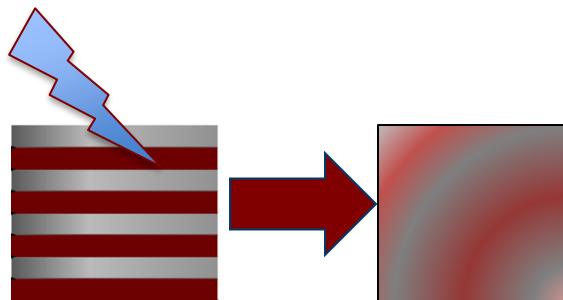
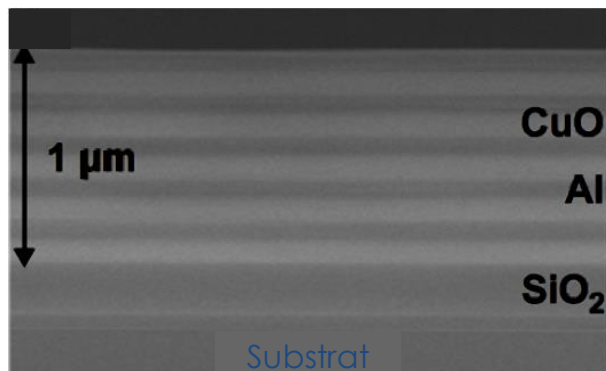


Crucial d'avoir une vision atomistique de comment les couches de mélanges sont formées AU COURS du procédé (**CONNAITRE L'HISTOIRE DU MATERIAU**) pour prédire au mieux les performances finales
Nécessaire d'avoir recours à une modélisation du procédé

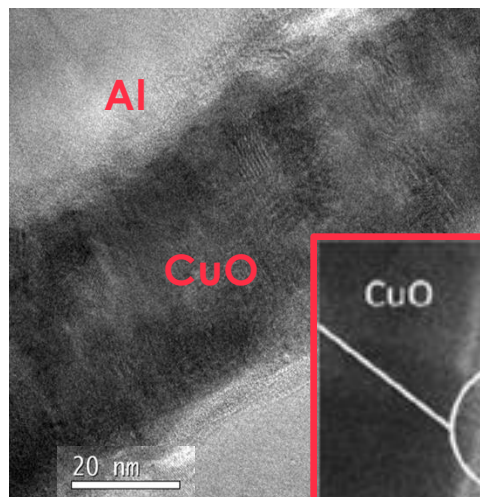
Matériaux énergétiques multicouches : Quésako ?

- Des matériaux énergétiques nanostructurés

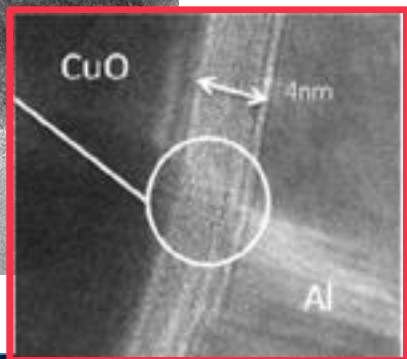
Cas d'étude AlCuO



- Des couches d'interface = couches barrières



- La réactivité dépend de la proximité des réactifs
- Interfaces jouent un rôle majeur et définissent les propriétés finales

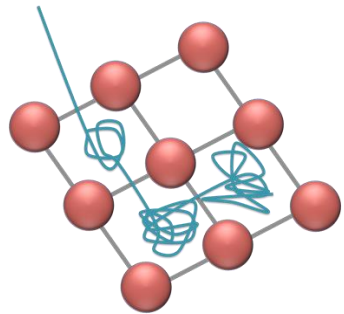
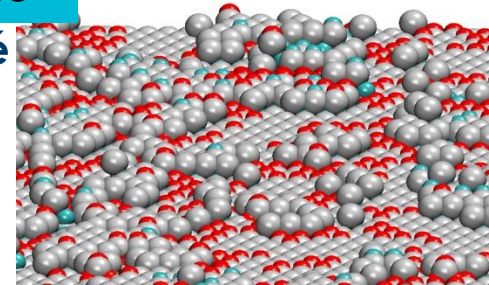


Compréhension des interfaces
=
Maîtrise des interfaces au cours du procédé
=
Contrôle des performances

Monte Carlo cinétique

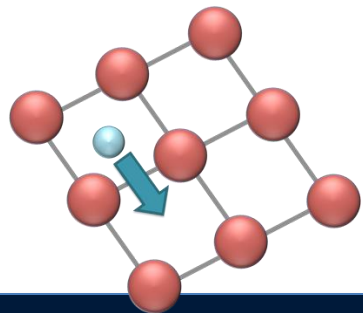
Cf. Nicolas Combe,
Normand Mousseau

- Suivre l'évolution **temporelle** d'un système
- Le Monte Carlo cinétique assigne un **temps de résidence t_i associé à chaque état i du système**. Ce temps de résidence est déterminé par le temps que va mettre le prochain événement à se produire.
- On va simuler la diffusion réelle, mais par une série de Sauts de diffusion



**Dynamique
Trajectoire
diffusion**

Simuler les flux
minimum local



**Monte Carlo
Sauts de diffusion**

Thermodynamique : Alliage, ...
Croissance : Diffusion de surface, épitaxie, ...
Evolution : Précipitation, ségrégation

« Identification des sauts » : créer
la bibliothèque d'événements

Events
filtering

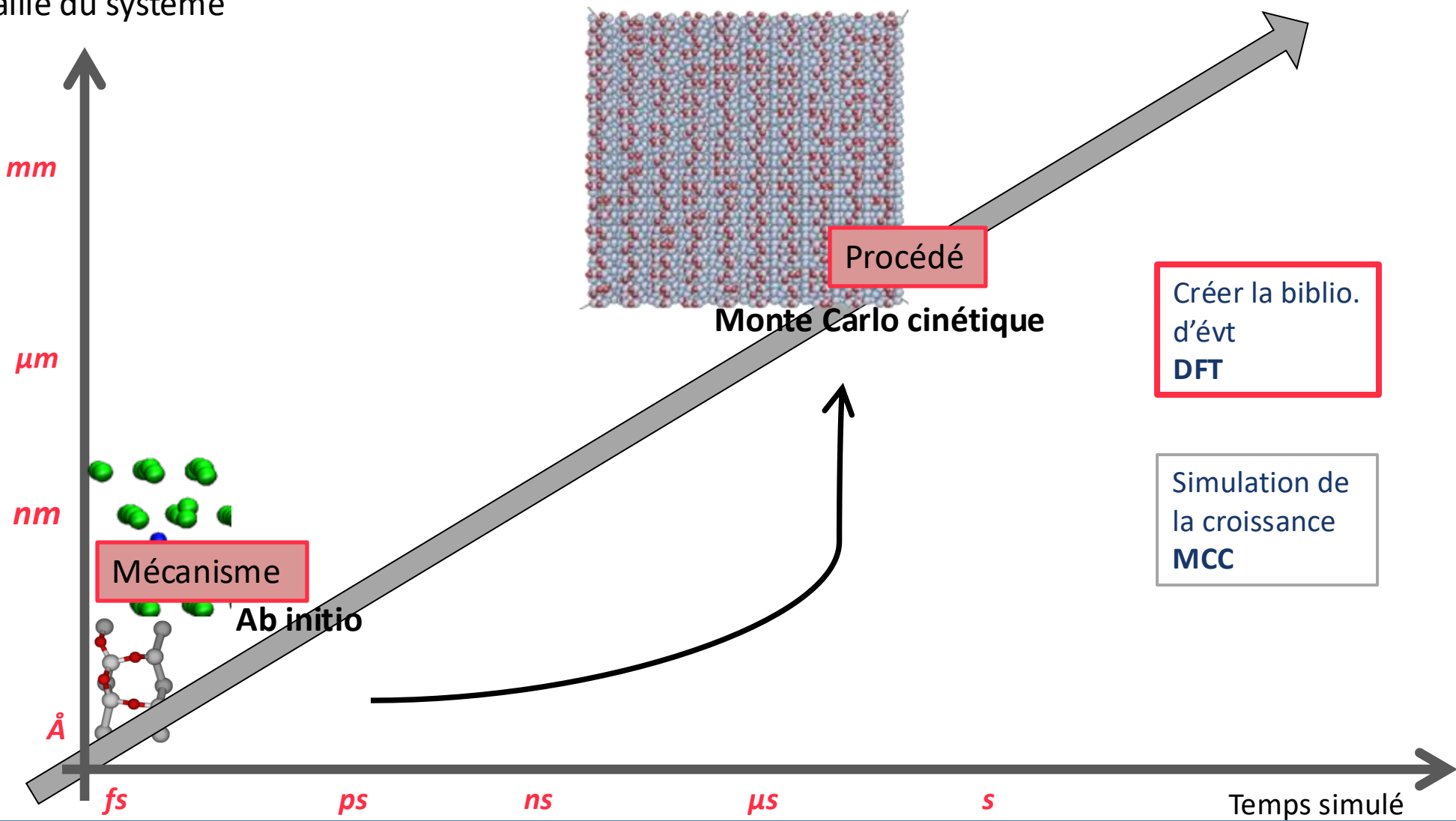
Advance time by

$$t_m = \frac{-\log(Z)}{\lambda_m}$$

Consistency
and Comparison

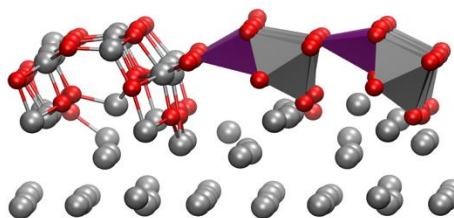
Pick next event,
Atomistic config.
change

Taille du système

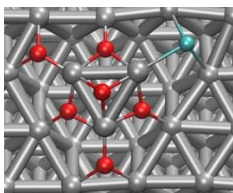
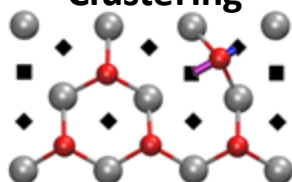


Mécanismes locaux

Mécanisme d'oxydation

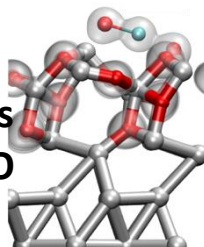


Clustering

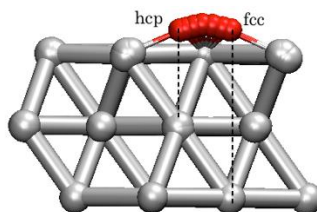


Piège pour les
Cu

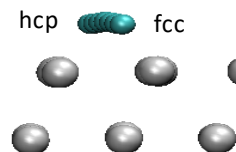
CuO ne se dissocie plus
Croissance de CuO



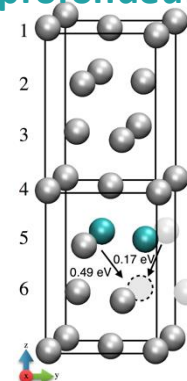
Diffusion
activée



Diffusion
rapide

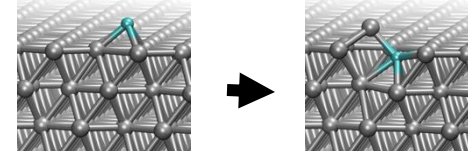


Diffusion en
profondeur



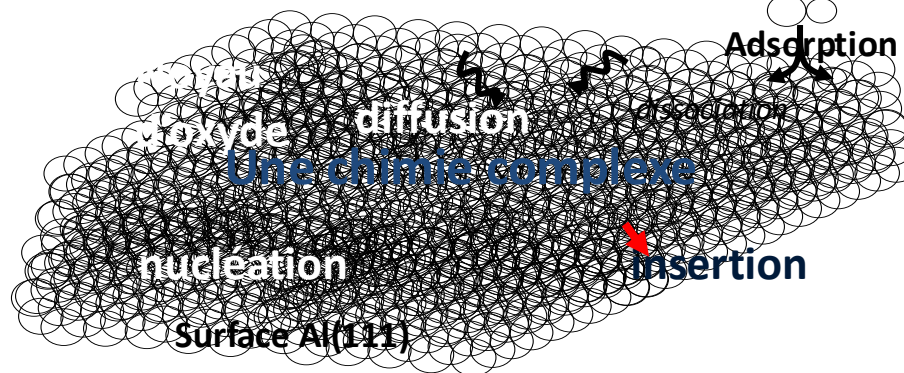
Diffusion en profondeur

Insertion du Cu



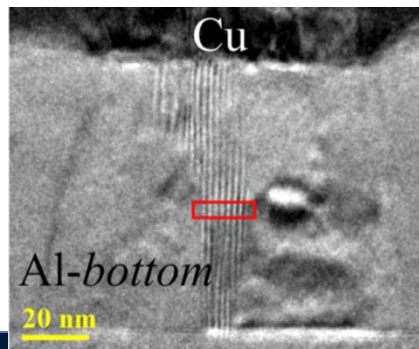
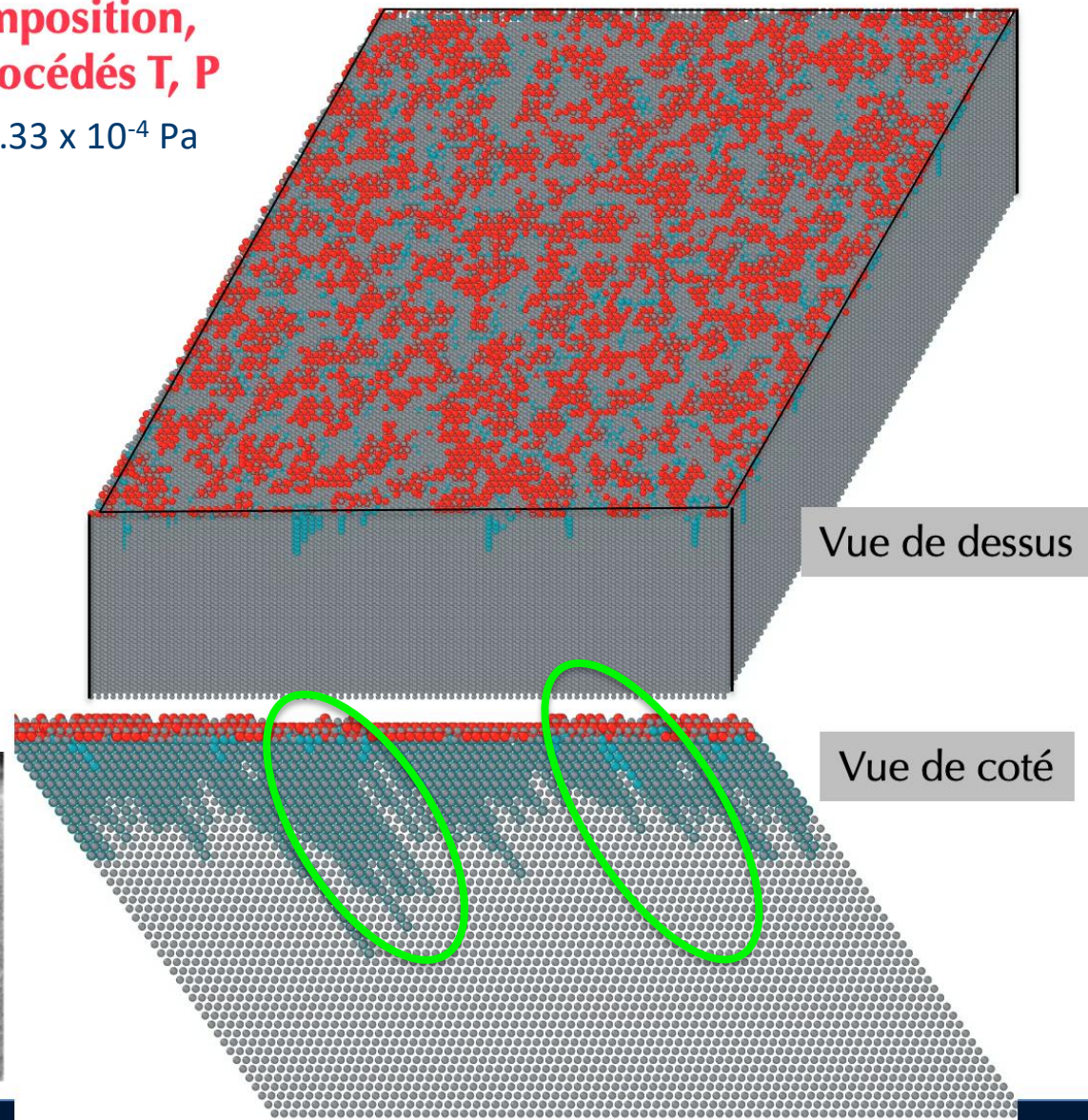
L'oxyde ralentit la
diffusion du cuivre

Croissance de l'oxyde
Cu freine la
croissance de l'oxyde

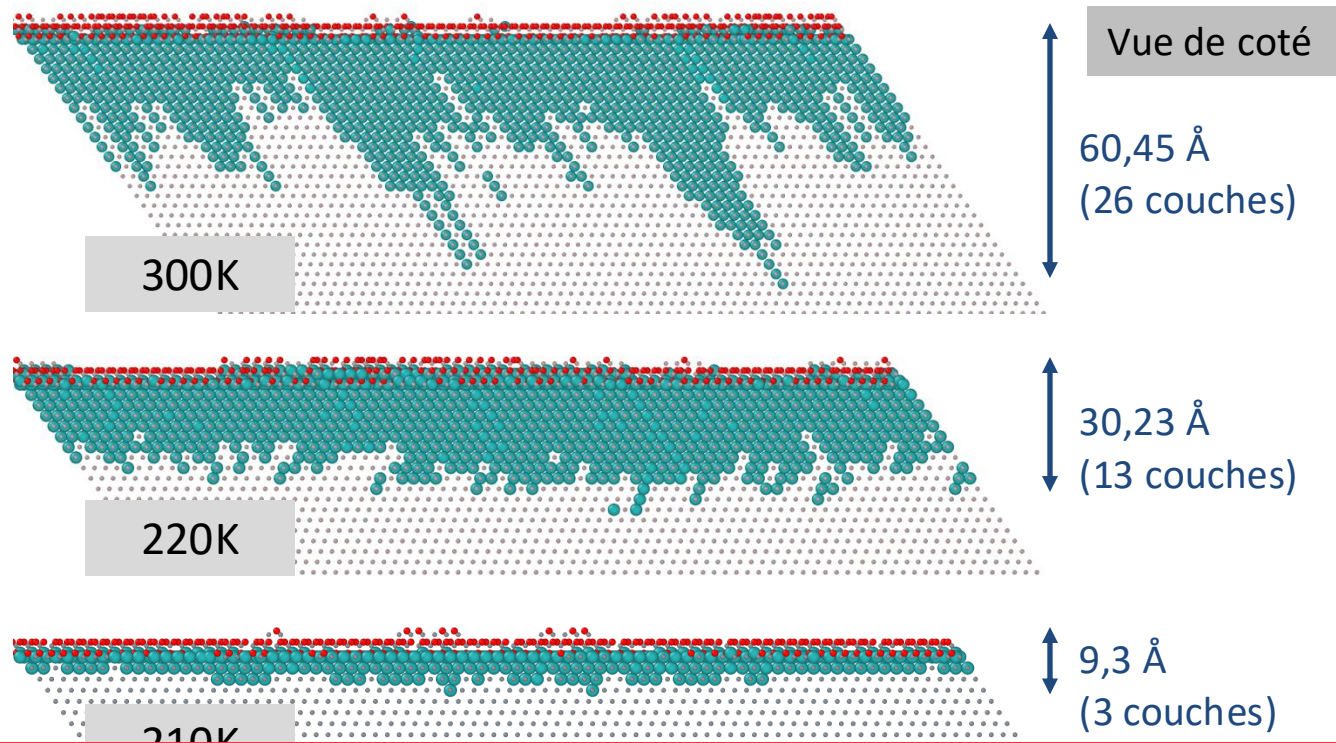


Structure, composition, Paramètres procédés T, P

$T=300\text{K}$ & $P=1.33 \times 10^{-4} \text{ Pa}$



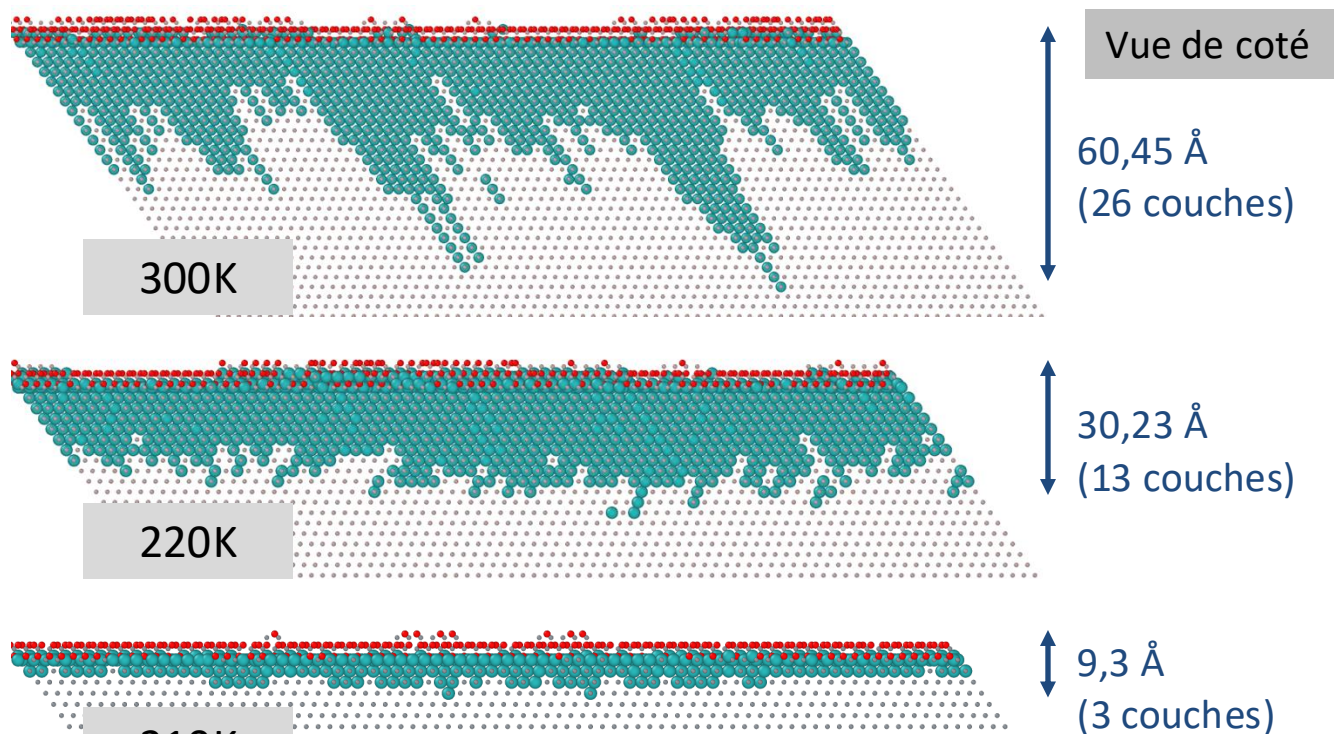
Structure, composition, Paramètres procédés T, P



- Organiser la matière à l'échelle atomique & structurer l'interface
- En mettant en compétition les arrivées (*i.e.* P) vs les diffusions (*i.e.* T)
- **T est un paramètre crucial pour piloter les cinétiques de diffusion et adapter les interfaces**

- Possible uniquement grâce à une exploration fine en DFT pour appréhender les mécanismes de croissance

Structure, composition, Paramètres procédés T, P

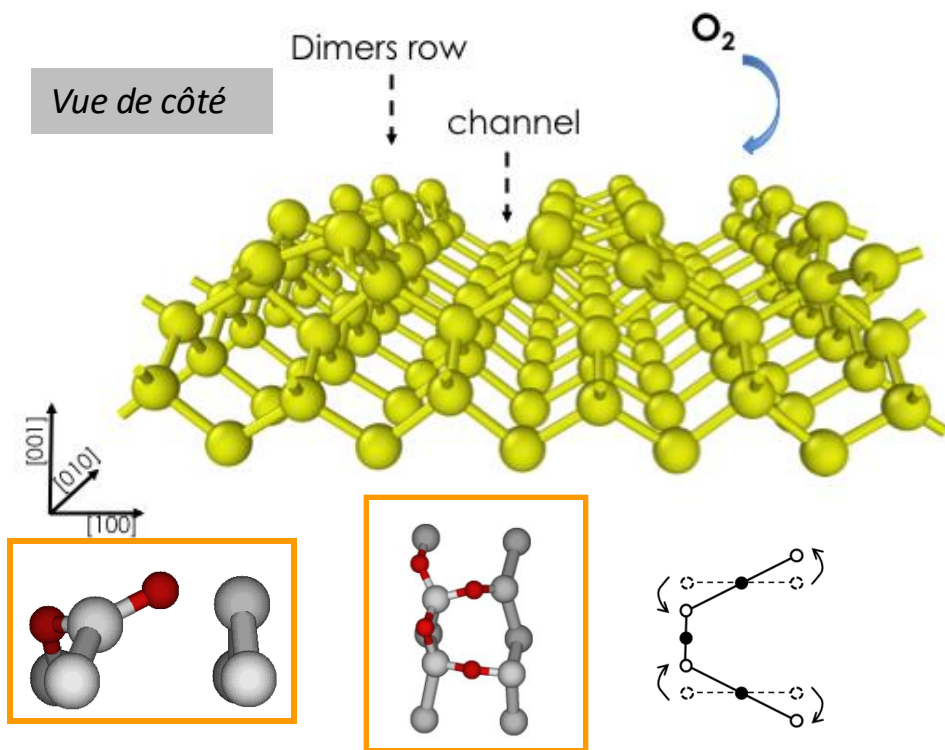


Limites de la DFT face aux mécanismes de reconstruction à grande échelle, à des effets élastiques, ...

Associer, couplage avec d'autres méthodologies pour une meilleure exploration de la SEP

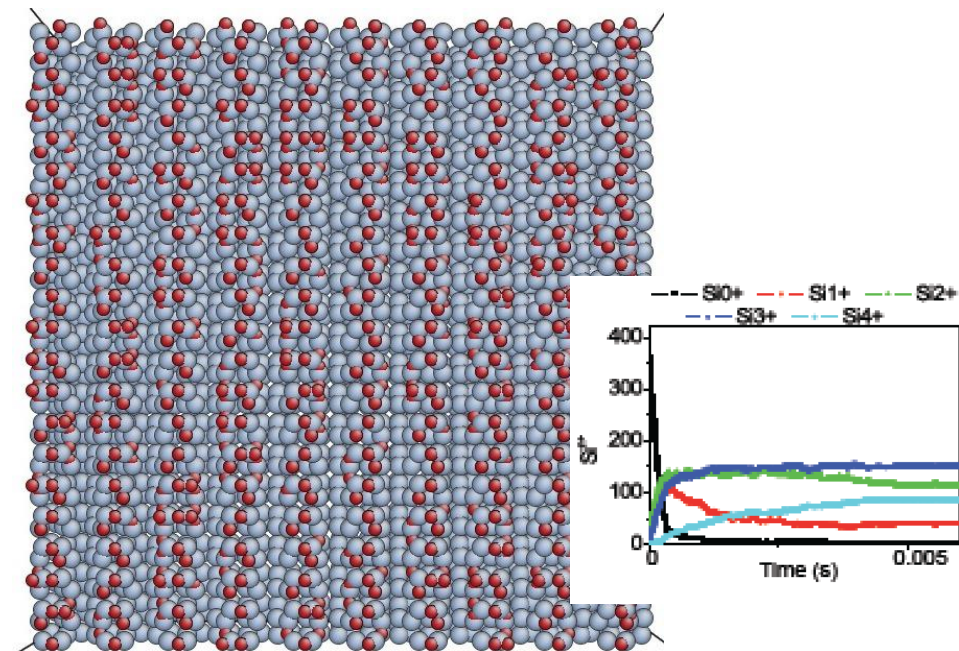
DFT

identification de structures clés et des Eac
Augmentation du recouvrement en molécule O_2
sur la surface de Si
→ Proposition d'un **scenario** pour l'oxydation
thermique du Si (de 1 à 4 molécules ... et ensuite ?)

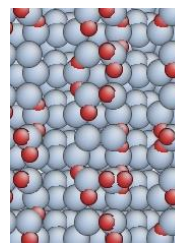


kMC

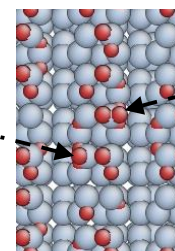
→ croissance d'une ML de Si oxydé



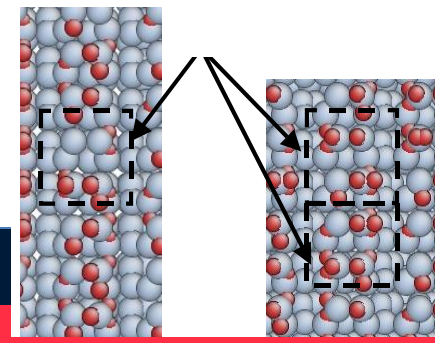
Non oxidized
dimer



Strand O atom

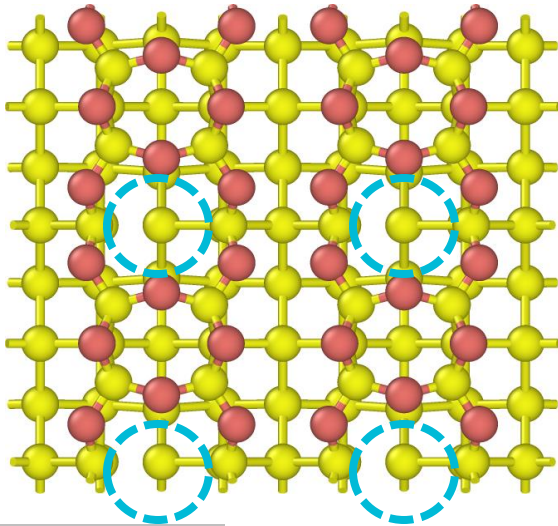


Grain boundaries

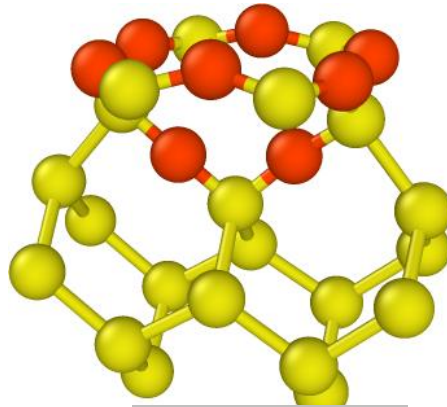


Oxydation thermique du Silicium

■ DFT + MCC - Et après ?



Vue de dessus



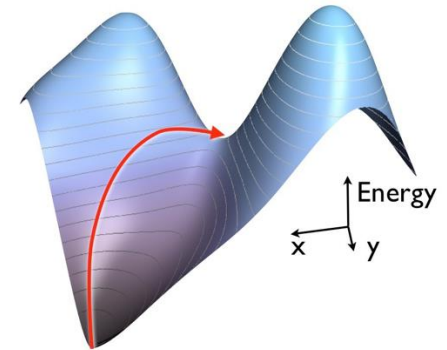
Vue de côté

Comment procéder ensuite ?

A ce stade, l'espace des configurations est devenu trop complexe

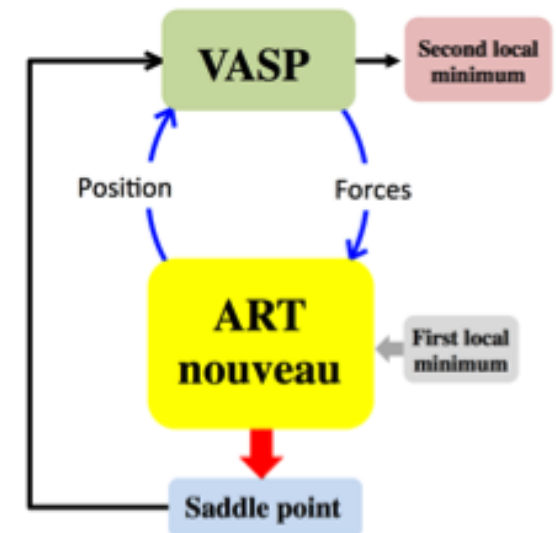
Trop coûteux & trop difficile pour continuer de façon intuitive avec la DFT

■ Couplage DFT-ARTn



Barkema & Mousseau, Phys. Rev. Lett. 77 (1996)

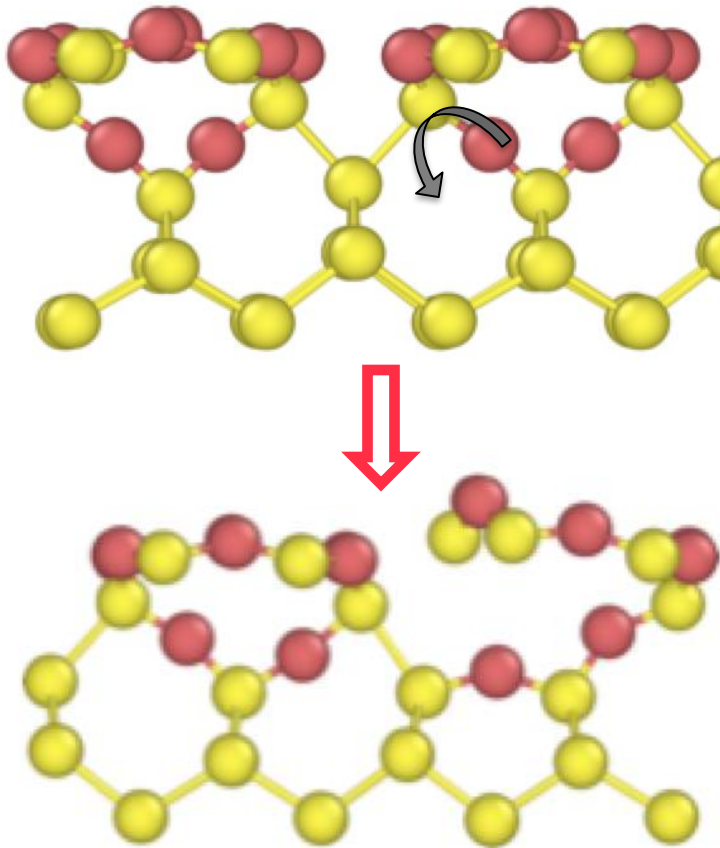
Malek & Mousseau, Phys. Rev. E 62 (2000)



Oxydation thermique du Silicium

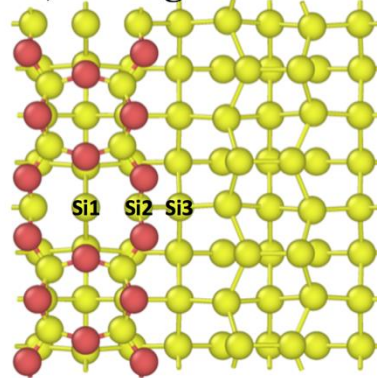
> Diffusion atomique à l'interface Si/SiO₂

Diffusion de O à l'interface

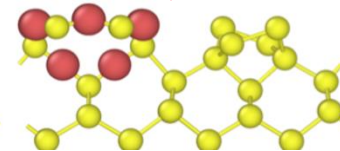


Pour plusieurs recouvrements

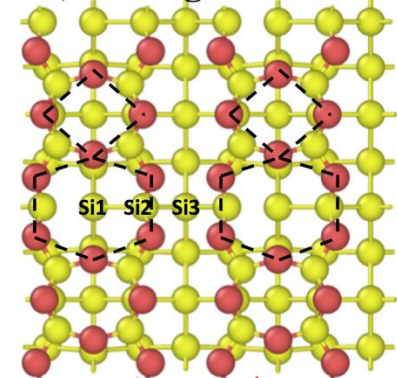
a) Configuration A



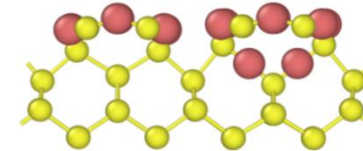
+ 1 O₂ mol



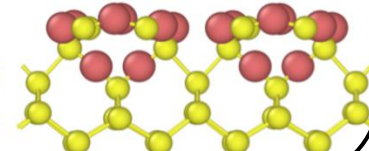
b) Configuration B



+ 1 O₂ mol



+ 3 O₂ mol



> Energie de déformation (formalisme de Keating)

$$E_{Strain} = \frac{1}{2} \sum_i \mathbf{\hat{a}} k_b (b_i - b_0)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathbf{\hat{a}} k_q (\cos q_{ij} - \cos q_0)^2$$

Oxydation thermique du Silicium

A1-#2

$E_{\text{strain}} = 21.06 \text{ eV}$

B1-#2

$E_{\text{strain}} = 35.24 \text{ eV}$

B3-#2

$E_{\text{strain}} = 36.55 \text{ eV}$

- Diffusion pilotée par la contrainte
- Au fur et à mesure que l'oxydation avance, la contrainte est accumulée à l'interface
- Quand l'énergie de contrainte devient trop forte, elle autorise des diffusions non possibles à bas recouvrement
 - La contrainte agit comme un « catalyseur »
- Cohérent avec le mode de croissance couche par couche

- Couplage ART-VASP : efficace et précis mais coûteux
- Nouveaux événements (*trop nombreux ?*) à implémenter dans le MCC
- Une nouvelle version du MCC par introduction d'un champ de contrainte

E_{ac}

dE

9 eV

0.9 eV

Conclusions

- Granularité atomique est nécessaire pour la microélectronique
→ Les modèles atomistiques jouent un rôle critique en tant qu'outils d'ingénierie

- ✓ Associer des méthodologies est efficace et rapide

- Attention aux limitations de chaque « outil »
- Ici : exhaustif dans la bibliothèque d'événements, calculs intensifs en amont, paysages énergétiques complexes, nombre croissant

- ✓ Couplage entre 2 méthodologies permet de progresser dans la construction de nouveaux modèles, prise en compte d'effets supp.

- Ici : dans l'identification de nouveaux mécanismes
 - Nécessité de nouvelle méthode / nouveau couplage d'exploration ?
- Lever les limites de certaines méthodologies

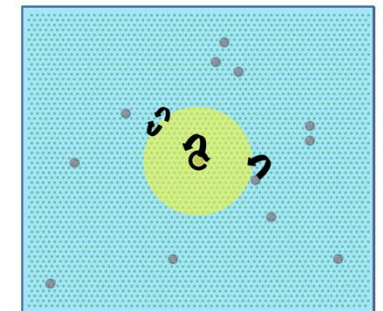
➤ Propagation des Incertitudes Cf. G. Perrin

- ✓ Augmentation des moyens de calculs → Multitudes de données

- Coût humain et coût de calculs deviennent non supportables
- Nouvelles approches inspirées de l'IA



Paysage dans la Vallée de la mort



Cf. Travaux de Charlotte Becquart
Couplage kART, kMC

Cf. Atelier - J. Lam
Cf. A. Bartok

Merci pour votre attention !