

Modélisation par Monte Carlo cinétique de la croissance de films minces de Cu dans des conditions énergétiques

F. Nita^{a,b*}, C. Furgeaud^a, C. Mastail^a, A. Michel^a, G. Abadias^a

- a. Institut P' Département Physique et Mécanique des Matériaux, UPR 3346, CNRS-Université de Poitiers-ENSMA, TSA 41123, 86073 Poitiers cedex 9, France ;
- b. Institut national de recherche et de développement en microtechnologies - 126A, rue Erou Iancu Nicolae, 077190, Voluntari, Ilfov, Roumanie.

* email : florin.nita@univ-poitiers.fr

Durant la croissance, l'évolution des propriétés microstructurales des films minces est principalement pilotée par les paramètres de dépôt. Dans le cas du processus de dépôt par pulvérisation, outre la vitesse de dépôt et la température du substrat qui influent sur les mécanismes de diffusion en surface, la prise en compte de la contribution des particules énergétiques est essentielle pour comprendre et contrôler l'évolution des morphologies de croissance (rugosité de surface, facettage), la densité du film ainsi que l'état de contrainte. Les stratégies de recherche basées sur les approches multi-échelle peuvent donc apporter des informations précieuses pour prédire la morphologie de croissance des couches minces. Les modèles de Monte Carlo cinétique (kMC) sont les mieux adaptés pour rendre compte de la nature stochastique du processus de dépôt et se rapprocher des conditions expérimentales sur des échelles d'espace et de temps réalistes.

Un modèle kMC 3D destiné à étudier la croissance cristalline du cuivre, modèle qui est facilement adaptable aux systèmes de symétrie CFC, est proposé. Les principaux événements qui peuvent se produire lors du développement de la phase cristalline (dépôt, diffusion et désorption) sont mis en œuvre en tenant compte de l'anisotropie de surface du cuivre. Les trois surfaces de haute symétrie (100), (110) et (111) sont prises en compte. Une règle de contact avec la surface, similaire à celle que nous avons utilisée dans le code MODENA pour la croissance de TiN [1], est également utilisée. Comme pour MODENA, différentes méthodes de dépôt sont disponibles permettant de prendre en compte différentes distributions angulaires (flux collimaté, distribution SIMTRA).

Pour une énergie donnée de la particule incidente, l'événement de dépôt est un événement complexe, composé de plusieurs événements élémentaires. La particule peut se fixer à la surface sur le site primaire (là où elle a touché la surface d'un objet 3D qui existe déjà dans la boîte de simulation) ou sur un site secondaire plus ou moins éloigné du site primaire par un processus de « biased diffusion » [2]. La particule incidente peut être rejetée de la surface ou peut éjecter une autre particule à proximité de son site primaire. Ainsi, nous simulons la réflexion ou la pulvérisation d'une particule [3]. La pulvérisation est suivie d'une réorganisation locale de la surface connue dans la littérature sous le nom de "diffusion athermique", diffusion générée par un pic thermique (« athermal diffusion » et « thermal spike ») [2]. Les valeurs numériques pour les paramètres nécessaires à la mise en œuvre de ces événements dans le cas du cuivre sont extraites de la littérature [2,3]. La création des défauts de type interstitiel et la recombinaison lacune-interstitiel sont également prises en compte dans le modèle.

En ce qui concerne la diffusion, le modèle actuel est limité aux seules particules qui n'ont pas plus de six plus proches voisins. Les valeurs des énergies nécessaires pour calculer les barrières de diffusion (énergie de migration, énergie d'interaction premier et deuxième voisin et énergie de la barrière Schwoebel) sur les trois surfaces spécifiées sont extraites de la littérature [4,5,6,7].

Les résultats présentés se focaliseront sur l'étude des premiers stades de croissance (nucléation, coalescence) et seront confrontés à des données expérimentales acquises à partir de diagnostics in situ et en temps réel.

- [1] F. Nita, C. Mastail, G. Abadias, Phys. Rev. B 93 (2016) 064107
- [2] X.W. Zhou, H.N.G. Wadley, Surface Science 431 (1999) 42–57
- [3] X.W. Zhou, H.N.G. Wadley, Surface Science 431 (1999) 58–73
- [4] H. Yildirim et al., Surface Science 600 (2006) 484-492
- [5] G.A. Evangelakis, N.I. Papanicolaou, Surface Science 347 (1996) 376-386Surface Science 34 376-
- [6] GA Evangelis et al., Vacuum 50 (1998) 165-169
- [7] G.C. Kallinteris, G.A. Evangelakis, N.I. Papanicolaou, Surface Science 369 (1996) 185-198