

Analyse et suivi en temps réel des premiers stades de croissance de films minces : le cas MoSi

A. Michel¹, C. Mastail¹, J.J. Colin^{1,2}, A. Fillon^{1,3}, B. Krause⁴, G. Abadias¹, T. Baumbach⁴

1 Département PMM, Institut Pprime, CNRS - Université de Poitiers - ENSMA, UPR 3346, SP2MI, Téléport 2, Boulevard Marie et Pierre Curie, BP 30179, F86962 Chasseneuil, France

2 adresse actuelle : INSA, UMR CNRS 6226, équipe chimie-métallurgie, Rennes, France

3 adresse actuelle : équipe PHOTO, LAAS, Toulouse, France

4 IPS, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Allemagne

Comprendre les premiers stades de croissance est d'une importance capitale pour contrôler le développement de la microstructure et la morphologie de films minces. En particulier, la croissance de films métalliques sur silicium présente un intérêt pour les composants semiconducteurs de dimensions nanométriques. La pulvérisation magnétron offre des conditions de dépôt fortement hors-équilibre, de ce fait les aspects cinétiques de croissance peuvent prévaloir sur les prédictions thermodynamiques. Ainsi, pour des métaux à forte mobilité, une croissance en îlots est privilégiée alors qu'une croissance bidimensionnelle sera favorisée à basse mobilité ; cependant les réactions interfaciales ne peuvent être négligées.

Dans le but d'étudier les effets chimiques aux interfaces, nous avons déposé des films minces de Mo, d'alliages $\text{Mo}_{1-x}\text{Si}_x$ ($0 < x < 0.2$) et de multicouches Mo/a-Si par pulvérisation magnétron sur Si oxydé. Le suivi *in-situ* des contraintes durant la croissance, effectué grâce à un montage optique multi-faisceaux, apporte un éclairage sur les premiers stades de la croissance ; tandis que la mesure de résistivité électrique offre le moyen de caractériser la formation d'alliage ou d'un film métallique continu. Grâce à des analyses complémentaires (diffraction des rayons X, METHR), les différents stades de l'évolution des contraintes et de la résistivité ont été corrélés avec la contrainte de surface, la croissance d'une couche initiale à l'état amorphe, et finalement une transition amorphe-cristal pour une épaisseur critique dépendante de la teneur en Si. Enfin pour une preuve directe de ce changement de phase, des mesures réalisées au synchrotron ANKA (Karlsruhe), ont combiné trois méthodes d'analyse *in situ*, la réflectivité X, la diffraction X et le suivi de contraintes. La corrélation entre la formation de la phase cristalline et une forte contrainte en tension est ici clairement démontrée.

Pour expliquer les liens étroits entre la nucléation cristalline et le processus de dépôt en conditions réalistes, une stratégie de simulation multi-échelle est nécessaire. La première étape est l'étude par méthodes *ab initio* des mécanismes élémentaires à l'œuvre durant le dépôt de Mo sur Si, ainsi l'adsorption de Mo est préférentielle sur des sites de nature interstitielle. Les barrières de diffusion élevées sur la surface de Si expliquent la faible mobilité du Mo, et une incorporation de Mo sous la surface de Si est mise en évidence.

Ces résultats montrent qu'en utilisant des études expérimentales et de simulation, nous pouvons établir une méthodologie de prédiction de la microstructure des films dès les premiers stades de croissance.