

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第4515131号
(P4515131)

(45) 発行日 平成22年7月28日(2010.7.28)

(24) 登録日 平成22年5月21日(2010.5.21)

(51) Int.Cl.		F I		
HO 1 L 21/3205	(2006.01)	HO 1 L 21/88		Z
HO 1 L 23/52	(2006.01)	HO 1 L 21/66		S
HO 1 L 21/66	(2006.01)	HO 1 L 21/66		Z

請求項の数 3 (全 16 頁)

(21) 出願番号	特願2004-100093 (P2004-100093)	(73) 特許権者	503360115
(22) 出願日	平成16年3月30日(2004.3.30)		独立行政法人科学技術振興機構
(65) 公開番号	特開2005-286202 (P2005-286202A)		埼玉県川口市本町四丁目1番8号
(43) 公開日	平成17年10月13日(2005.10.13)	(74) 代理人	100105371
審査請求日	平成17年12月27日(2005.12.27)		弁理士 加古 進
		(72) 発明者	笹川 和彦
			弘前市清原 2-16-1 ハウス千葉B
		(72) 発明者	長谷川 昌孝
			仙台市鷺ヶ森2-12-39サンヒルズ鷺ヶ森202
		審査官	空 哲次

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 多層構造配線のEM損傷による原子濃度分布評価システム

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項1】

多層構造配線のEM損傷による原子濃度分布評価システムであって、

2次元FEM解析による前記多層構造配線の各要素の電流密度分布、温度分布を計算するFEM解析手段と、

予め得た配線薄膜特性の定数と、前記FEM解析手段から得た電流密度分布、温度分布により、バンブー配線の原子流束発散AFD^{*}_{li}を計算するAFD^{*}_{li}計算手段と、

前記各要素の原子数の変化を、前記AFD^{*}_{li}の値をもとに計算することで、実時間で割り当てられた時間増分における前記各要素中の原子濃度Nを計算する原子濃度変化計算手段と、

前記AFD^{*}_{li}計算と、原子濃度変化計算とを、いずれかの要素において原子濃度Nの値が臨界原子濃度になるまで、あるいは、Nの値が臨界原子濃度に達することなく原子濃度分布が定常状態を維持するまで実行させる反復手段とを備え、

前記AFD^{*}_{li}は、

【数1】

$$AFD_{li}^* = \frac{1}{2} \left(AFD_{li}^* + |AFD_{li}^*| \right)$$

であり、 AFD_{ii}^* は、

【数 2】

$$AFD_{ii}^* = \frac{C_{ii}^* N}{T} \exp\left(-\frac{Q_{ii} + \kappa\Omega(N - N_T)/N_0 - \sigma_T\Omega}{kT}\right) \times$$

$$\left[\frac{1}{T} \left(\frac{Q_{ii} + \kappa\Omega(N - N_T)/N_0 - \sigma_T\Omega}{kT} - 1 \right) \left\{ Z^* e \rho \left(j_x \frac{\partial T}{\partial x} + j_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \frac{\kappa\Omega}{N_0} \left(\frac{\partial N}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} \right) \right\} \right.$$

$$\left. - \frac{\kappa\Omega/N_0}{kT} \left\{ Z^* e \rho \left(j_x \frac{\partial N}{\partial x} + j_y \frac{\partial N}{\partial y} \right) - \frac{\kappa\Omega}{N_0} \left(\frac{\partial N}{\partial x} \frac{\partial N}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial y} \frac{\partial N}{\partial y} \right) \right\} - \frac{\kappa\Omega}{N_0} \left(\frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial y^2} \right) \right]$$

J : 原子流束ベクトル, N : 原子濃度, k : ボルツマン定数, T : 絶対温度, Q : 原子拡散の活性化エネルギー, κ : 保護膜拘束下の濃度変化と応力変化との間の係数, Ω : 原子体積, σ_T : 引張りの熱応力, N_T : σ_T が作用したときの原子濃度, N_0 : 無応力状態における原子濃度, Z^* : 有効電荷数, e : 単位電荷, ρ : 抵抗率,

であることを特徴とする多層構造配線の EM 損傷による原子濃度分布評価システム。

【請求項 2】

前記予め得た配線薄膜特性の定数は、 AFD_{ii}^* による理論的な配線端ドリフト速度と複数の電流密度と基板温度の組の実験による計測値とを、最小 2 乗法により最適化パラメータとして決定することを特徴とする、請求項 1 に記載の多層構造配線の EM 損傷による原子濃度分布評価システム。

【請求項 3】

請求項 1 又は 2 に記載の多層構造配線の EM 損傷による原子濃度分布評価システムの機能をコンピュータシステムに実現させることを特徴とするプログラム。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、ビア導体 (Via : ビア) を介した多層構造配線のエレクトロマイグレーション (EM) による断線の予測に関するものである。

【背景技術】

【0002】

従来、電子デバイス配線の寿命予測は、経験式を用いて行われていたが、この式を用いるにあたり、式中の配線形状に依存した定数を決定する必要があった。このため、普遍的な予測ができず、煩雑であった。また、式中の定数を決定するために行う通電実験の実験条件の設定により、予測結果が異なってしまい、一般に精度がいいとは言えなかった。これまでに、発明者らによって、断線故障の主要因であるエレクトロマイグレーション (EM) 損傷の支配パラメータが理論的に定式化され、これを用いた高精度で普遍的な断線予測手法が開発されている (特許文献 1 参照)。しかしながら、この手法は、表面に保護膜のない配線を対象としていた。実用の配線は、一般に保護膜で被覆されており、この場合、EM による配線内の原子濃度 (応力) 勾配が発生し、これに起因した原子拡散が EM による原子拡散を打ち消すように作用するため、一般に配線寿命が長くなると言われている。最近、これらを考慮した保護膜を有する配線のための EM 損傷支配パラメータが特定され、断線故障に関する信頼性評価手法が開発された (特許文献 2 参照)。

昨今の半導体デバイスの微細高集積化に伴い、ビア導体 (ビア) と呼ばれる端子で接続された多層構造の回路が形成されるようになっており、このような構造を呈する配線に対する高精度信頼性評価の手法の開発が待望されている。

【特許文献 1】特開 2000 - 306969 号公報

【特許文献 2】特開 2002 - 43316 号公報

【発明の開示】

10

20

30

40

50

【発明が解決しようとする課題】

【0003】

電子デバイス配線に保護膜被覆が存在し、その両端がビア端子で接続されている場合、これ以上の電流密度を作用させたらEMによる配線損傷が生じるという「しきい電流密度」が存在することが知られている。同配線の損傷支配パラメータを理論的に定式化し、さらに、このパラメータを用いるにあたり、必要となる物性定数の決定法を開発するとともに、同パラメータを用いた、計算機システムで行なう数値シミュレーション手法によるしきい電流密度の評価システムを提供するものである。

【課題を解決するための手段】

【0004】

上記目的を達成するために、本発明は、多層構造配線のEM損傷による原子濃度分布システムであって、2次元FEM解析による前記多層構造配線の各要素の電流密度分布、温度分布を計算するFEM解析手段と、予め得た配線薄膜特性の定数と、前記FEM解析手段から得た電流密度分布、温度分布により、バンパー配線の原子流束発散AFD^{*}_{1i}を計算するAFD^{*}_{1i}計算手段と、前記各要素の原子数の変化を、前記AFD^{*}_{1i}の値をもとに計算することで、実時間で割り当てられた時間増分における前記各要素中の原子濃度Nを計算する原子濃度変化計算手段と、前記AFD^{*}_{1i}計算と、原子濃度変化計算とを、いずれかの要素において原子濃度Nの値が臨界原子濃度になるまで、あるいは、Nの値が臨界原子濃度に達することなく原子濃度分布が定常状態を維持するまで実行させる反復手段とを備え、

前記AFD^{*}_{1i}は、

【数3】

$$AFD_{ii}^* = \frac{1}{2} \left(AFD_{ii}^* + |AFD_{ii}^*| \right)$$

であり、AFD^{*}_{1i}は、

【数4】

$$AFD_{ii}^* = \frac{C_{ii}^* N}{T} \exp \left(-\frac{Q_{ii} + \kappa \Omega (N - N_T) / N_0 - \sigma_T \Omega}{kT} \right) \times$$

$$\left[\frac{1}{T} \left(\frac{Q_{ii} + \kappa \Omega (N - N_T) / N_0 - \sigma_T \Omega}{kT} - 1 \right) \left\{ Z^* \exp \left(j_x \frac{\partial T}{\partial x} + j_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \frac{\kappa \Omega}{N_0} \left(\frac{\partial N}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} \right) \right\} \right.$$

$$\left. - \frac{\kappa \Omega / N_0}{kT} \left\{ Z^* \exp \left(j_x \frac{\partial N}{\partial x} + j_y \frac{\partial N}{\partial y} \right) - \frac{\kappa \Omega}{N_0} \left(\frac{\partial N}{\partial x} \frac{\partial N}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial y} \frac{\partial N}{\partial y} \right) \right\} - \frac{\kappa \Omega}{N_0} \left(\frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial y^2} \right) \right]$$

J：原子流束ベクトル，N：原子濃度，k：ボルツマン定数，T：絶対温度，Q：原子拡散の活性化エネルギー， κ ：保護膜拘束下の濃度変化と応力変化との間の係数， C_{ii}^* ：原子体積， σ_T ：引張りの熱応力， N_T ： σ_T が作用したときの原子濃度， N_0 ：無応力状態における原子濃度， Z^* ：有効電荷数，e：単位電荷， ρ ：抵抗率

であることを特徴とする。

【0005】

前記予め得た配線薄膜特性の定数は、AFD^{*}_{1i}による理論的な配線端ドリフト速度と複数の電流密度と基板温度の組の実験による計測値とを、最小2乗法により最適化パラメータとして決定することが望ましい。

また、上述の多層構造配線のEM損傷による原子濃度分布評価システムの機能をコンピュータシステムに実現させることを特徴とするプログラムも本発明である。

10

20

30

40

50

【発明の効果】

【0006】

本評価システムを使用することにより、実際の配線構造により即した、保護膜被覆を有するビア接続配線を対象とした「しきい電流密度」の評価、ひいては同配線の高精度な信頼性評価が可能となる。また、保護膜を有する配線のためのEM損傷支配パラメータに含まれる物性定数の決定法を用いることにより、配線内部の熱応力の評価および保護膜と配線の相互作用による拡散係数（活性化エネルギー）の評価が可能となり、さらに、集積回路を設計する上での配線各々の形状を考慮した許容電流密度を与えることが可能となる。本評価システムを適用できる形状は、直線形状に限らず、曲がったものやテーパのついたものなども含まれる。

10

【発明を実施するための最良の形態】

【0007】

電子デバイス配線に保護膜被覆が存在し、その両端がビア端子で接続されている場合、これ以上の電流密度を作用させたらエレクトロマイグレーション（EM）による配線損傷が生じるという「しきい電流密度」が存在することが知られている。このような配線の損傷支配パラメータを理論的に定式化し、さらに、パラメータを用いるにあたり必要となる物性定数の決定手法を開発するとともに、同パラメータを用いた数値シミュレーションによるしきい電流密度評価システムを以下に説明する。

【0008】

<保護膜で被覆されたバンパー配線中の損傷支配パラメータ>

20

まず、保護膜で被覆されたバンパー配線中の損傷支配パラメータについて説明する。定式化は、被覆していない金属配線に対するパラメータ ADF_{1i} （特許文献1参照）に基づいて行われる。保護膜で被覆されたバンパー配線中の原子流束発散 ADF^*_{1i} は、被覆されていない配線のEM損傷に対する支配パラメータ ADF_{1i} に原子濃度勾配の影響を付加することで定式化される。

ところで、ビア接続された配線のカソード端は、EMの結果により電子流の方向に移動（ドリフト）することが知られている。バンパー配線の場合のドリフト（移動）速度は、原子拡散に関する配線端における境界条件（配線端での原子の流入及び流出）を考慮することで、理論的に表現できる。ここで表現されたドリフト速度は ADF^*_{1i} を含んでいる。薄膜の特性定数は、ドリフト速度を計測することで決定される。ドリフト速度計測のための実験には、ビア接続を模擬した試験用配線を用いる。 ADF^*_{1i} による理論的なドリフト速度と実験によるものとを等しいと置くことにより、 ADF^*_{1i} 内の薄膜の特性定数が得られる。

30

【0009】

（原子流束発散 ADF^*_{1i} ）

保護膜で被覆されたバンパー配線に対する原子流束発散 ADF^*_{1i} が、ここで定式化される。保護膜で被覆されたバンパー配線中の原子の移動は、下記のように与えられると仮定する。

【数3】

$$|J| = \frac{ND_0}{kT} \exp\left\{-\frac{Q_i + \kappa\Omega(N - N_T)/N_0 - \sigma_T\Omega}{kT}\right\} \left\{ Z^* e \rho j^* - \frac{\kappa\Omega}{N_0} \frac{\partial N}{\partial l} \right\} \quad (1)$$

40

ここで、 J ：原子流束ベクトル， N ：原子濃度， D_0 ：振動数項， k ：ボルツマン定数， T ：絶対温度， Q_i ：原子拡散の活性化エネルギー， κ ：保護膜拘束下の濃度変化と応力変化との間の係数， Ω ：原子体積， σ_T ：引張りの熱応力， N_T ： σ_T が作用したときの原子濃度， N_0 ：無応力状態における原子濃度， Z^* ：有効電荷数， e ：単位電荷， ρ ：抵抗率， j^* ：電流密度ベクトルの原子流束ベクトル J 方向成分， $\partial N / \partial l$ ：原子濃度勾配の原子流束ベクトル J 方向成分である。

この式では、応力勾配による原子の逆流及びEMにより金属配線中に生じた応力の影響

50

が考慮されている。これはまた、バンブー配線中では、結晶粒界での原子発散は無視することができ、EMによる界面拡散を含む格子拡散が支配的であることを仮定している。この仮定の背景には、結晶粒界は少なく、存在したとしても、それらは配線の長さ方向に対して垂直であることがある。被覆されていないバンブー配線においては、結晶粒界の質量移動に対する所謂ブロッキング効果が存在し、EM誘発のポイドは、結晶内ではなく、結晶粒界のみで形成され、成長することが報告されている。

結晶粒界がバンブー配線でのEM損傷の形成にかなり寄与しているとすれば、ポイドは結晶粒界に沿ってスリット状となって現れるはずである。電流負荷後における保護膜被覆したAl/TiN配線の平面図と断面図(図示せず)からは、カソード端でのドリフトによるEM損傷だけが見つかり、スリット状ポイドはどこにも見つからなかった。従って、結晶粒界はEM損傷の形成にほとんど寄与していないと考えられるので、ここでは、結晶粒界は存在しないものとみなす。式(1)に基づき、バンブー配線のEMによる原子流束発散AFD^{*}_{1i}は、

【数4】

$$\begin{aligned}
 AFD_{ii}^* &= \text{div} J \\
 &= \frac{C_{ii}^* N}{T} \exp\left(-\frac{Q_{ii} + \kappa\Omega(N - N_T)/N_0 - \sigma_T\Omega}{kT}\right) \times \\
 &\quad \left[\frac{1}{T} \left(\frac{Q_{ii} + \kappa\Omega(N - N_T)/N_0 - \sigma_T\Omega}{kT} - 1 \right) \left\{ Z^* \rho \left(j_x \frac{\partial T}{\partial x} + j_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \frac{\kappa\Omega}{N_0} \left(\frac{\partial N}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} \right) \right\} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\kappa\Omega/N_0}{kT} \left\{ Z^* \rho \left(j_x \frac{\partial N}{\partial x} + j_y \frac{\partial N}{\partial y} \right) - \frac{\kappa\Omega}{N_0} \left(\frac{\partial N}{\partial x} \frac{\partial N}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial y} \frac{\partial N}{\partial y} \right) \right\} - \frac{\kappa\Omega}{N_0} \left(\frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial y^2} \right) \right] \quad (2)
 \end{aligned}$$

で与えられる。ここで、 $C_{ii}^* = D_0 / k$ であり、 AFD_{ii}^* は、結晶内および、配線とその周辺の境界面における原子流束の発散量を表している。ポイド形成に寄与する原子流束発散量に着目することとし、 AFD_{ii}^* の正值のみの期待値を求めると、以下のようにパラメータAFD^{*}_{1i}が定義される。

【数5】

$$AFD_{ii}^* = \frac{1}{2} \left(AFD_{ii}^* + |AFD_{ii}^*| \right). \quad (3)$$

もしある場所でAFD^{*}_{1i}が負値をとる場合には、そこではポイド形成への寄与はないため、AFD^{*}_{1i}をゼロとして扱う。パラメータAFD^{*}_{1i}は、単位体積および単位時間当りに減少する原子数を表す。

【0010】

(ドリフト速度の式)

ICに使用する金属配線はピア接続されることが多く、多層配線の構造となっている。このような配線では、カソード端とアノード端それぞれでは原子の出入りが無い。これは、大電流入力パッド/出力パッド等の原子貯蔵部が金属配線に接続されていないからである。その結果、配線のカソード端では電子流への方向にドリフトが発生する。図1は、配線10のカソード端で発生するドリフトの概略図である。図1で、 x は、ドリフト長 l_d から得られる微小長を示すもので、これは大きな数 m で等分して得られたものである。原子流が x 軸に沿って非線形に変化すると、 $x = l_d$ での原子流束 $J|_{x=l_d}$ は、近似的に、

10

20

30

40

【数6】

$$J|_{x=l_d} = J_0 + \sum_{n=1}^m \frac{dJ_{n-1}}{dx} \cdot \Delta x \quad (4)$$

として表される。ここで、 J_n は、 $x = n \cdot \Delta x$ ($n = 1, 2, \dots, m$)における原子流束であり、 J_0 は、配線端での原子流束を示している。 l_d は、配線長と比べて量的に非常に小さいため、 dJ_{n-1}/dx は、ドリフト領域内で一定($= dJ_0/dx$)とみなすことができる。この場合、式4は、以下のように簡略化できる。

【数7】

$$\begin{aligned} J|_{x=l_d} &= J_0 + \frac{dJ_0}{dx} \cdot l_d \\ &= J_0 + AFD_{li}^*|_{str} \cdot l_d \end{aligned} \quad (5)$$

ここで、 $\sum_{n=1}^m \Delta x$ と dJ_0/dx は、それぞれ、 l_d と $AFD_{li}^*|_{str}$ で置換されている。

シンボル $AFD_{li}^*|_{str}$ は、簡略化した AFD_{li}^* を示しており、ここでは、直線状の配線端を考慮し、電流密度、温度勾配、原子濃度、および原子濃度勾配の y 成分は無視できる。なお、ドリフト体積は、原子流束が $J|_{x=l_d}$ で $x = l_d$ 断面を通過して消滅したはずである。従って、配線幅 w 、配線厚 $thick$ 、原子体積 V_{atom} 、およびドリフト領域の体積の消滅時間 t_d を式(5)に乗ずることで、ドリフト領域の体積、即ち、 $l_d \cdot w \cdot thick$ を表すことができる。その結果、配線端のドリフト速度 v_d ($= l_d / t_d$)は、以下の式で与えられる。

【数8】

$$v_d = (J_0 + AFD_{li}^*|_{str} \cdot l_d) \Omega \quad (6)$$

【0011】

(ドリフト測定による薄膜特性定数の決定方法)

式 AFD_{li}^* に含まれる薄膜特性定数は、 Q_{li}^* 、 Z^* 、 C_{li}^* および $\gamma \cdot N / x$ である。ここでは、直線状の配線を想定して、これらの特性を決める方法を導く。ブレック(Blech)によれば、原子濃度勾配は配線長に依存し、その長さに反比例する。EM損傷の初期段階では、原子濃度分布は、配線に沿って線形とみなされる。積 $\gamma \cdot N / x$ は、直線配線の長さに依存する特性として与えられる。

薄膜特性 $Q_{li}^* [= Q_{li} - T]$ 、 Z^* 、 C_{li}^* および $\gamma \cdot N / x$ は、以下のように、直線配線のカソード端におけるドリフト現象を利用し、一定の期間、加速試験を行って、実験的に決める。この実験は、3つの異なる基板温度 T_{s1} 、 T_{s2} 、 T_{s3} のもとで、配線に電流密度 j_1 を入力する。さらに、 j_1 とは異なる電流密度 j_2 においても温度 T_{s2} で加速試験を行う。各実験条件をそれぞれ、条件-1： j_1 と T_{s1} 、条件-2： j_1 と T_{s2} 、条件-3： j_1 と T_{s3} 、条件-4： j_2 と T_{s2} とする。そして、各試験条件における配線のカソード端の温度をそれぞれ T_1 、 T_2 、 T_3 、 T_4 とする。これらの温度値を得るため、熱伝導電気問題のFEM解析を行う。配線端のドリフト長は、一定の期間、電流の負荷を与えた後に測定する。ドリフト速度 v_d の値は、上記の4種類の試験条件下で実験的に得る。未知の薄膜特性定数は、最小2乗法を使用して得ることができる。即ち、次の差の総和が最小値となるように特性値を決める。

10

20

30

40

【数 9】

$$F_{ii}^*|_{end} = \sum_i \sum_j \left[v_d|_{ij} - \left\{ J_0|_i + (AFD_{ii}^*|_{sr})_i \cdot I_d|_{ij} \right\} \Omega \right]^2 \quad (7)$$

ここで、添え字 i と j はそれぞれ、条件の番号と各試験条件で測定したデータ数を示している。これにより、薄膜特性値を、ドリフト速度の測定で得られた全実験データを近似する最適化パラメータとして決定することができる。

【0012】

< 実験による確認 >

実験に使用した金属配線は、以下のように製造した。シリコン酸化膜で被覆されたシリコン基板上にスパッタリング装置で TiN 層を成膜し、これに続いて、真空蒸着により TiN 上に Al 薄膜を蒸着した。試料には、通常のリソグラフィによりパターンが形成され、RIE 技術でエッチングした。Al の試験配線両端の微小部分を化学的にエッチングし、そこでのみ TiN 部分を露出した。金属配線の構築後、パンプ構造を形成するため、試料を 673 K で 90 分間アニール処理した。次に、試料表面に PECVD により TEOS 膜を蒸着した。この TEOS 膜の厚さは 1.0 μm であった。上記のように形成した金属配線の外形寸法を図 2 に示す。図 2 (a) は平面図、図 2 (b) は断面図である。FIB 装置と FE-SEM によるマイクロ組織の観察から、配線幅と配線厚の両方向に 1 つだけ結晶粒があるため、使用した金属配線はパンプ状の構造であることが確認された。断面画像は、FIB を使用して、金属配線をその縦軸に沿って切断した後に FE-SEM によって得た。

実験では、端部のドリフトやボイド形成が始まるまでの潜伏期間を得るため、配線における電圧降下の変化を観測した。3 つの異なる基板温度 508, 523, 538 K を選択した。各温度において、金属配線に 4.5 MA/cm² の密度の直流電流を与える (条件 - 1, - 2, - 3)。さらに、基板温度が 523 K、4.8 MA/cm² の電流密度のもとで試験を行った (条件 - 4)。各試験条件で 10 個の試料を使用した。電流供給の前後で、図 3 に示すように、レーザー顕微鏡で金属配線のカソード端を観察した。図 3 (a), (b) に示すように、電流負荷の前後で、電流出力パッドからカソードエッジまでの距離を測定し、減算をしてドリフト長を得た。正味の電流供給時間で除したドリフト長より、ドリフト速度を得た。正味の電流供給時間は、電流供給時間から潜伏期間を減算して得た。

ドリフト速度の実験データを式 (7) に代入し、最小 2 乗法を使用して未知の薄膜特性値を最適化した。得られた定数を表 1 に掲載する。

【表 1】

$Q_{ii}^*[\text{eV}]$	Z^*	$C_{ii}^*[\text{K}\mu\text{m}^2/\text{Js}]$	$\kappa\partial N/\partial x [\text{J}/\mu\text{m}^7]$
0.75	-1.2	2.2×10^{26}	1.8

得られた Q_{ii}^* の値は 0.75 eV であり、バルク拡散について以前報告されている値 1.4 eV よりも幾分か小さかった。

【0013】

図 2 (b) に示すように、実験で使用した Al 配線 160 は、TEOS (SiO₂) 170 および TiN 層 150 で囲んだ。EM による原子拡散は、Al と SiO₂ のような絶縁体との境界面では発生しないことが知られている。これは、Al が SiO₂ に反応して Al の酸化被膜を形成するため、Al/SiO₂ 境界面での原子拡散が中断するからである。Al と自然酸化薄膜との境界面での原子拡散の中断も報告されている。もしも、Al/TEOS (SiO₂) 境界面における EM がボイド形成にかなり寄与しているならば、この境界面に沿ってボイドが形成されるはずである。しかし、観察では、そのようなボイ

ドが形成されなかったことを物語っている。FIB装置を使用して配線の縦軸に沿って金属配線を切断した後、FE-SEMを使って、ドリフトした配線の断面を斜めから観察した。その結果、Al/TiO₂の境界面における原子拡散の可能性を排除できた。

【0014】

一方、AlとTiN間の境界面が、TiN層上でのバンパーAl配線の拡散メカニズムに寄与しているとの報告がある。さらには、Al/他の金属基層(Ti, Cr, W等)界面が拡散に寄与するとの報告もある。もしも、Al/TiN境界面における原子拡散が、バンパー配線でのEMによる損傷に寄与しているとした場合、Al/TiN境界面にEMに誘発されたボイドが現れるはずであり、この境界面に沿ってスリット状のボイドが形成されるはずである。ドリフトした領域の拡大観察像には、Al/TiN境界面に形成された短いスリット状ボイドが認められた。従って、Al/TiN境界面での原子拡散は、いくらかボイド形成に寄与したものと考えられる。

なお、バンパー配線における原子拡散経路は、いくつかの文献で議論中の問題であり、ある研究者は、主たる拡散経路は格子であると報告し、ある研究者は、境界面の拡散が主要なメカニズムであると主張している。バンパー配線における拡散経路は、材料システム(配線とその周辺との組み合わせ)、配線そのものの材料、あるいは製造条件に依存するといえる。従って、どのメカニズムが支配的であるとか、あるいは除外されると結論づけることは適当ではなく、バンパー配線では、両方のメカニズムが作用していると予想される。

【0015】

バンパー配線では、いずれかのメカニズムが優勢であると考えられるが、2つの拡散メカニズム(格子内での原子拡散と界面での原子拡散)を考慮すべきである。バンパー配線におけるEM損傷には、界面拡散を含む格子拡散が寄与しており、それが、 Q_{1i}^* 値がバルク拡散の活性化エネルギー1.4 eVよりも低かったことの原因であろう。発明者の知る限りでは、Al/TiN界面のみにおける真の活性化エネルギーが測定されたことはない。しかし、ここと同様の材料システム(Al/TiN配線)を扱っている文献によれば、これらの値は、おそらく界面活性化エネルギーと格子活性化エネルギーの両方を反映している活性化エネルギーとして0.5~0.95 eVという値が得られており、ここで得た Q_{1i}^* の値0.75 eVは、報告された値の範囲内であった。

他方、得られた Z^* 値は-1.2であり、以前に報告された値である-1~-1.5の範囲内にある。なお、関数 $G_{1i|end}^*$ は、式(6)の両辺の対数をとることで定義され、

【数10】

$$G_{1i|end}^* = \ln \left[\frac{v_d|y}{\frac{C_{1i}^* N_0}{T_i} \left(Z^* e \rho_i j_x|_i - \frac{\Omega}{N_0} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \right) \left[\Omega + \left\{ -\frac{\Omega/N_0}{kT_i} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} + \frac{1}{T_i} \left(\frac{Q_{1i}^* - a \cdot \kappa \cdot \partial N / \partial x}{kT_i} - 1 \right) \frac{\partial T}{\partial x} \right\} I_d|y \Omega \right]} \right]$$

(8)

で与えられる。ここで、 $a = \text{length} \cdot / (2 N_0)$ であり、lengthは配線長である。得られた薄膜特性値と測定したドリフト速度を $G_{1i|end}^*$ に代入して、その結果を、図4に示すように、 $1/T$ に対してプロットした。データは、直線上に配列した。直線相関の傾斜は、 $-(Q_{1i}^* - a \cdot \cdot N / x) / K$ を意味している。従って、最小2乗法が有効に働き、全実験データが適切に近似されたことがわかる。従って、薄膜特性定数が、 $A F D_{1i}^*$ で表されるドリフト速度を使用して正確に決定されたと結論できる。

【0016】

<しきい電流密度の評価>

ここでは、EM損傷の支配パラメータ $A F D_{1i}^*$ を使用して、保護層で被覆されたバ

10

20

30

40

50

ンブー配線についてしきい電流密度 j_{th} を評価する方法を説明する。ビア接続配線を模擬したパッドなし配線を想定して、原子濃度分布の生成プロセスの数値シミュレーションを行う。この数値シミュレーションの評価結果と実験結果を比較して、しきい電流密度の評価方法が有用であることを示す。しきい電流密度の評価方法が、支配パラメータ $A F D^*_{1i}$ に基づいてうまく構築されたものであるという事実は、同時に $A F D^*_{1i}$ の適切さを示すものである。

【0017】

(電流入出力パッドのない配線でのしきい電流密度評価)

しきい電流密度を評価する数値シミュレーションは、支配パラメータ $A F D^*_{1i}$ を使用して行う。仮定した配線を、図5に示すような要素に分割して、原子濃度分布生成プロセスのシミュレーションを行う。試験配線部分の両端は、他の配線部分の要素よりも細かい要素で分割される。微小要素の配線長さ方向の大きさは、図5に示すように l である。各要素の原子濃度を支配パラメータ値に基づいて変えて、原子濃度分布生成プロセスの数値シミュレーションを行う。要素の大きさが微細なほど、シミュレーションが正確になるため、実際の現象を表わすことができる。使用する要素は、シミュレーションの結果が収束するために十分に細くしなければならない。

図6に、原子濃度分布生成プロセスの計算手順を示す。最初に2次元FEM解析によって、配線の電流密度分布と温度分布を得る(S204)。FEM解析の結果と、前に説明した $A F D^*_{1i}$ に基づく方法で得た薄膜特性定数(205)とを利用して、各要素の原子流束発散 $A F D^*_{1i}$ を求める。実時間で割り当てられた時間増分における各要素中の原子の減少量あるいは増加量を計算することにより原子濃度 N を求める(S208)。原子濃度の変化は、端部の要素については $J_{end} + A F D^*_{1i}|_{str} \cdot l$ の値をもとに計算し、他の要素については $A F D^*_{1i}$ の値をもとに計算する(S206)。そして、各要素における原子濃度 N を計算し、この N の分布に基づいて、原子濃度勾配を計算する。図6のフローチャートに示すように、これらの計算を、繰り返し実行する(S210)。

なお、ボイド形成に対する臨界原子濃度 N_{min} と、ヒロック形成に対する臨界原子濃度 N_{max} とがあると想定できる。これらの値と、原子濃度の変化と応力の変化とを関連づける定数は、原子濃度分布の生成プロセスの数値シミュレーションを実行するために必要である。これらは、以下のようにして決めた。定数の推定値を用い、図6に示す反復計算を、実験で測定した潜伏期間の間実行する。シミュレーション後に配線における原子濃度勾配 N/x が与えられる。シミュレーションによる N/x の値と推定したとの積が、薄膜特性として実験で得た $\cdot N/x$ の値と一致するようにの値を決める。そして、得られた値を用い、再度原子濃度分布生成プロセスに関するシミュレーションを実行後、全要素での原子濃度値 N を得る。全要素での原子濃度の最小値を N_{min} とし、最大値を N_{max} とする。

【0018】

得られた値 $\cdot N_{min}, N_{max}$ を本数値シミュレーションに用い、予想対象配線にある仮定した入力電流密度が作用した場合の原子濃度分布生成プロセスをシミュレートする。いずれかの要素において N の値が臨界原子濃度になるまで、あるいは、 N の値が臨界原子濃度に達することなく原子濃度分布が定常状態を維持するまで(S210)、図6に示す反復計算を行う。前者の場合、シミュレーションで仮定した入力電流密度 j は、 j_{th} よりも大きいと判定され、後者の場合 j_{th} よりも小さいと判定される。よって、何種類かの電流密度によるシミュレーションにより、しきい電流密度を得ることができる。

【0019】

(評価結果)

ここでは、図2に示す金属配線でのしきい電流密度を評価する。基板温度を523Kとする。 $\cdot N_{min}, N_{max}$ の値は、前に説明した方法で定めた。シミュレーションで得た $\cdot N/x$ の値が表1に示す実験値と一致するようにの値を決めた。このようにして、 $= 50.6, GPa, N_{min} = 5.99 \times 10^{10} \mu m^{-3}, N_{max} = 6$

10

20

30

40

50

$0.7 \times 10^{10} \mu\text{m}^{-3}$ が得られた。

図7は、 $j = 1.0 \text{ MA/cm}^2$ の場合における、配線での原子濃度分布の時間変化である。横軸は、配線の中央からの距離を示す。図7(a)~(e)に示すように、原子濃度分布は時間とともに徐々に発達し、最終的には、定常状態分布となる。従って、しきい j_{th} 以下の入力電流密度では、このように原子濃度分布は定常状態となる。

図8は、入力電流密度 j に対する定常状態における、 N_0 で正規化した N の最小値すなわち、シミュレーション後における全要素中の原子濃度 N の最小値を示している。 N の定常最小値は、実線で示すように電流密度が増すにつれて N_{min} に近づくことが分かる。その結果、しきい電流密度は、実線と、破線で示す N_{min} / N_0 の値との交点から 3.62 MA/cm^2 と評価された。

10

【0020】

(実験による検証)

評価結果を検証するため、同じ配線形状(図2参照)についてしきい電流密度を実験的に得た。実験に使用した金属配線は、以下のようにして製造した。酸化シリコンで絶縁保護されたシリコン基板上にスパッタリング装置でTiNの薄膜を成膜し、続いて、そのTiN層の上に真空蒸着によりAl薄膜を蒸着した。実際のICでは、TiNといった高融点金属をビア接続されたAl配線の下に敷くことが多い。金属配線は、配線に形成されたボイド周辺の電流をバイパスする下層によって、電氣的に不連続となることを回避できる。Al蒸着の後、フォトリソグラフィにより試料にパターンを形成し、RIE技術でエッチングした。Alの配線両端の微小部分を化学的にエッチングし、そのTiN層を露出させた。金属配線の形成後、バンパー構造を形成するために、試料を673Kで90分間アニール処理した。次に、試料の表面にPE-CVDによりTEOS膜を蒸着した。図2に、形成された配線の寸法を示す。上述した配線構造は、ドリフト速度あるいはしきい電流密度の測定に研究者がしばしば使用するものである。

20

【0021】

加速試験では、基板温度が523Kで、密度が4.2, 4.5, 4.8 MA/cm^2 の3種類の直流電流を金属配線に与えた。試験条件として、一般的な動作条件に対して高電流密度で高基板温度を選ぶことで、検証実験に要する時間を減らした。電流供給後、まえに説明した方法でドリフト速度を得た。図9は、供給電流密度に対するドリフト速度についての実験結果を示している。実験データを線形外挿することで横軸を横切るしきい電流密度 $3.84 \pm 0.14 \text{ MA/cm}^2$ が得られた。

30

しきい電流密度について、評価値と実験値の良好な一致が得られた。このように一旦、薄膜特性値が与えられれば、 AFD^*_{1i} に基づく数値シミュレーションによってしきい電流密度の評価が可能となるということが明らかになった。数値シミュレーションでは、任意の動作温度で、どのような形状の金属配線のしきい電流密度をも評価することができる。しきい電流密度の評価方法に AFD^*_{1i} をうまく適用できたという事実から、支配パラメータ AFD^*_{1i} も有効であったと結論づけることができる。

なお、ここでは、実際のビア接続された配線に代えて、電流入出力パッドに直接接続されていない金属配線を扱った。ここで提案した、パッドのない配線のしきい電流密度の評価方法は、実際にビア接続された配線にも適用可能である。

40

【図面の簡単な説明】

【0022】

【図1】金属配線のカソード端における原子流を説明する図である。

【図2】対象である金属配線を示す図である。

【図3】電流供給前後の、配線端において観察した写真を示す図である。

【図4】実験値の近似値を示す図である。

【図5】要素に分割した金属配線とその拡大図を示す図である。

【図6】評価システムの処理を示すフローチャートである。

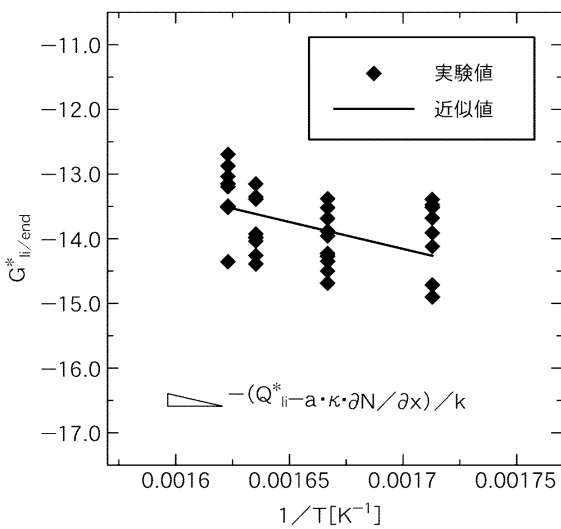
【図7】 $j = 1.0 \text{ MA/cm}^2$ の場合における原子濃度分布の時間変化を示すための図である。

50

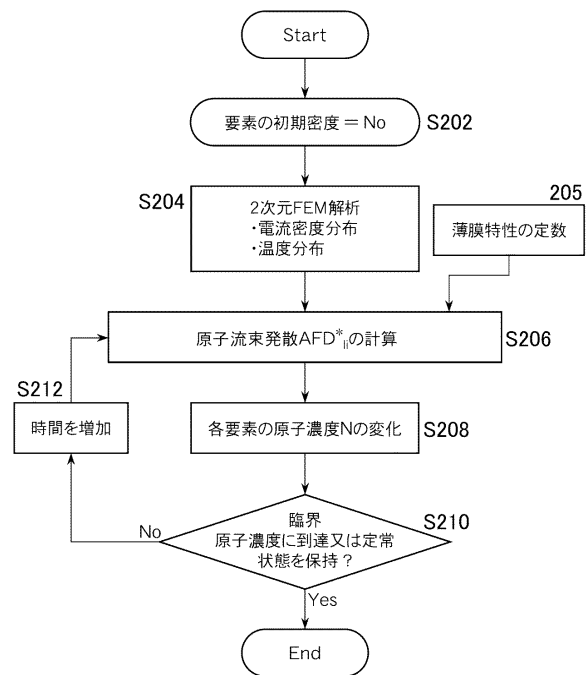
【図8】しきい電流密度の評価結果を示すグラフである。

【図9】しきい電流密度を得る実験の結果を示すグラフである。

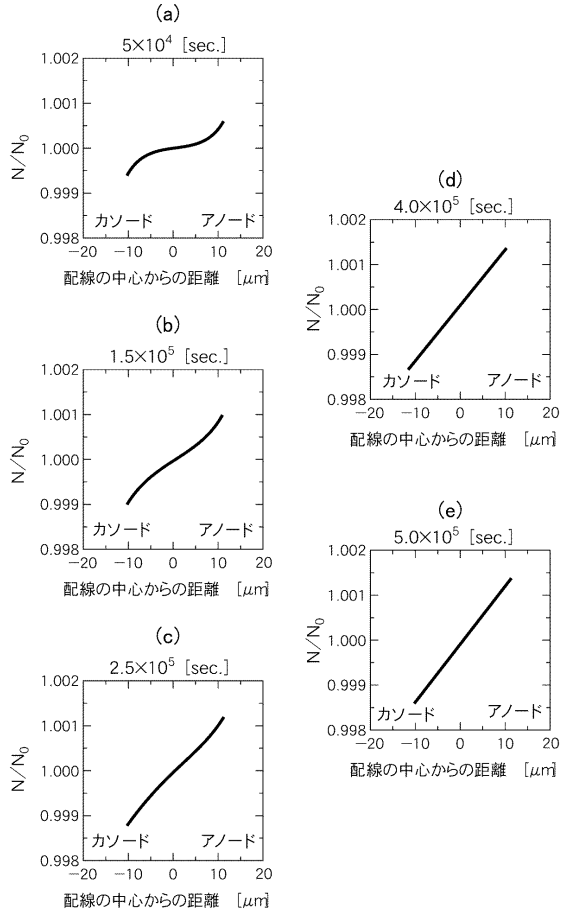
【図4】



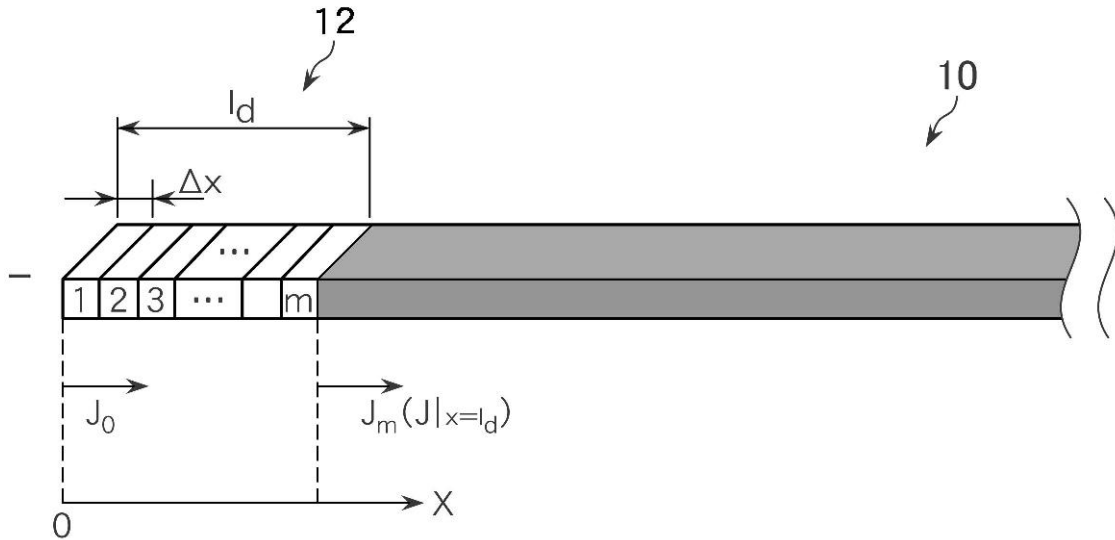
【図6】



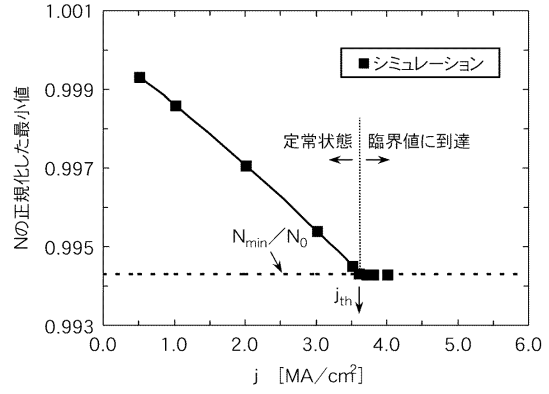
【 図 7 】



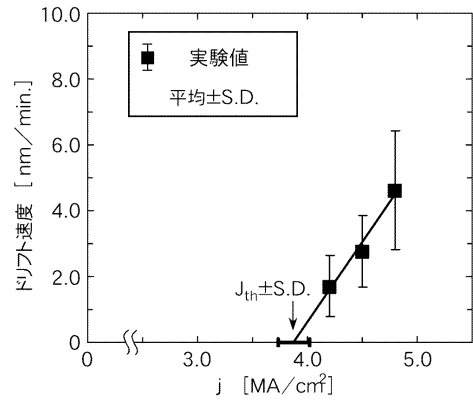
【 図 1 】



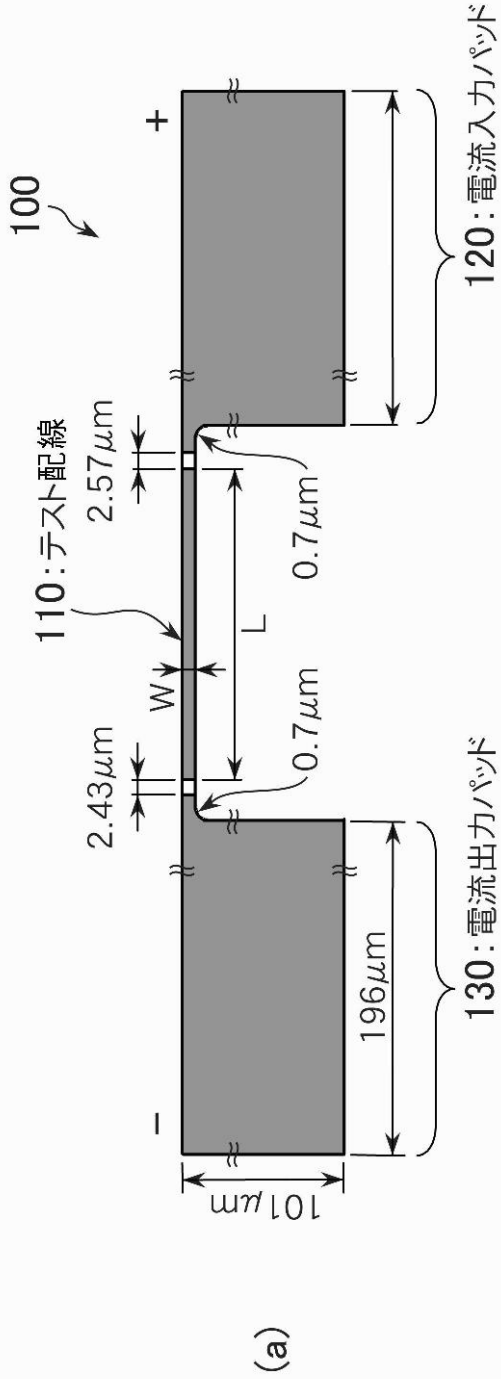
【 図 8 】



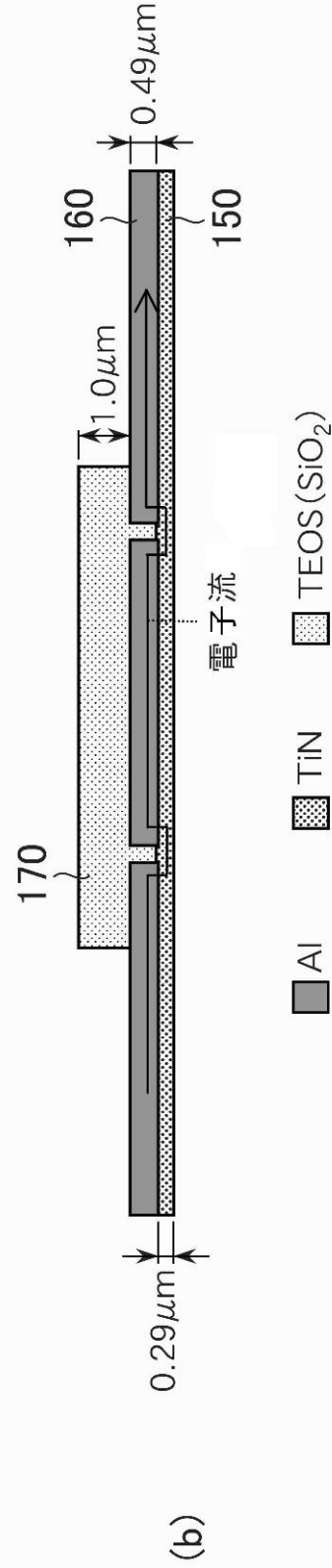
【 図 9 】



【 図 2 】

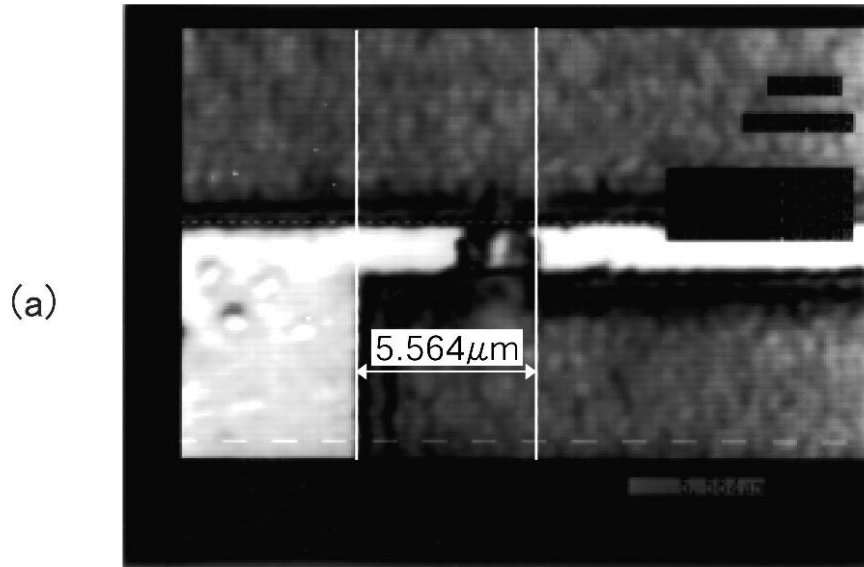


$L = 18.93\mu\text{m}$, $W = 0.980\mu\text{m}$

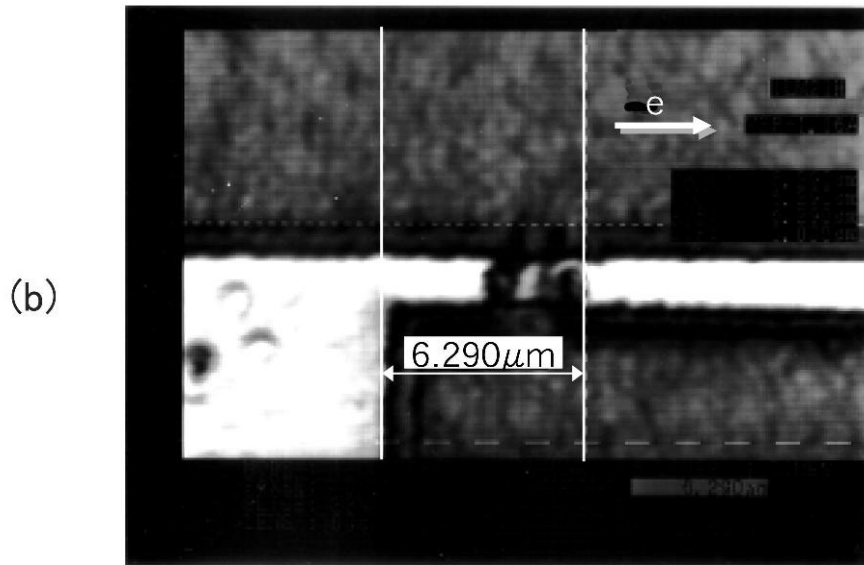


【図3】

配線の終端部分の観測例



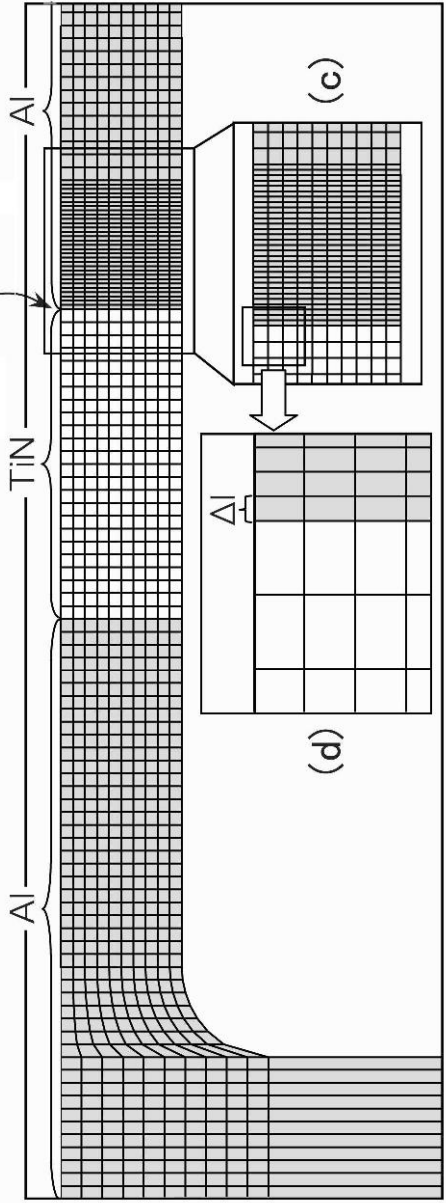
電流供給前



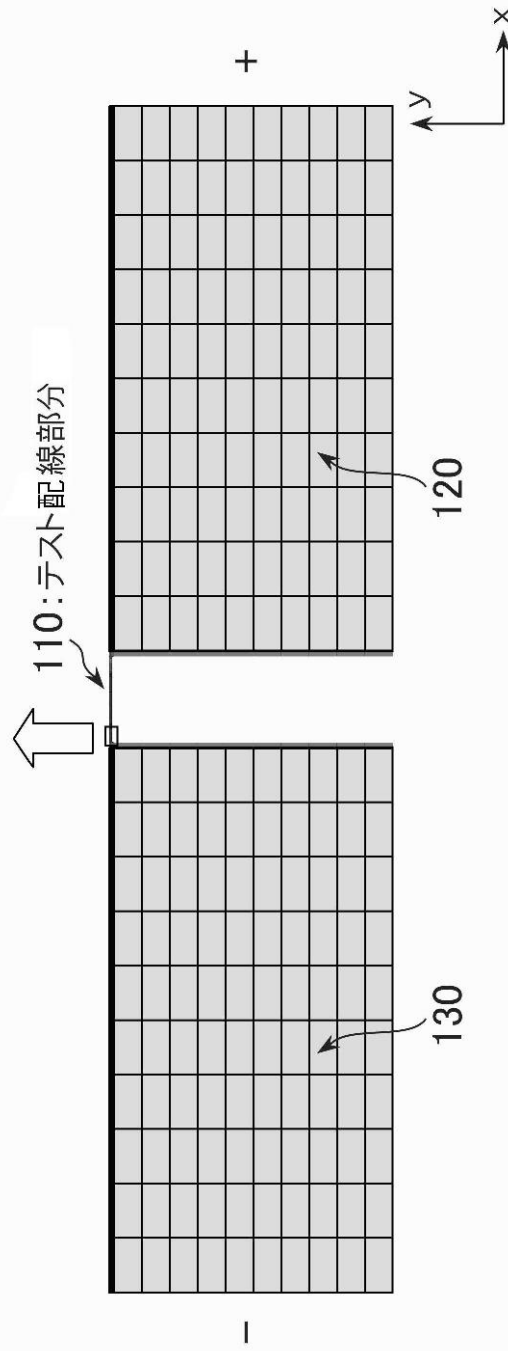
電流供給後

【図5】

テスト配線部分のカソード端



(b)



(a)

フロントページの続き

(56)参考文献 特開2000-306969(JP,A)
特開2002-43316(JP,A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

H01L 21/3205
H01L 21/3213
H01L 21/768
H01L 21/02
H01L 21/66
H01L 21/82
G06F 17/50