

(51) Int.Cl. <sup>7</sup>	識別記号	F I	テ-マコード <sup>8</sup> (参考)
H01L 21/3205		G01R 31/02	2G014
G01R 31/02		H01L 21/00	5E314
H01L 21/00		29/00	5F033
29/00		H05K 3/00	T
H05K 3/00		3/28	Z

審査請求 未請求 請求項の数 6 O L (全11頁) 最終頁に続く

(21)出願番号 特願2000 - 227023( P 2000 - 227023)

(22)出願日 平成12年 7月27日(2000.7.27)

(71)出願人 396020800

科学技術振興事業団

埼玉県川口市本町 4丁目 1番 8号

(72)発明者 笹川 和彦

青森県弘前市学園町 1 - 1 弘前大学職員

宿舍 32 - 1 - 24

(74)代理人 100105371

弁理士 加古 進

Fターム(参考) 2G014 AA01 AB31 AC19

5E314 FF11 GG05 GG26

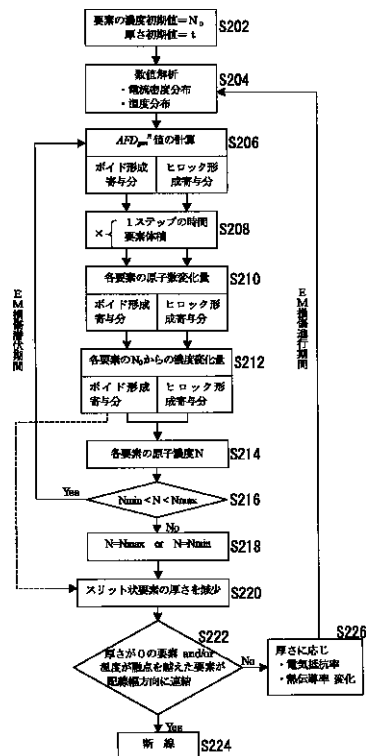
5F033 HH08 UU07 VV12

(54)【発明の名称】表面に保護膜を有する配線構造の損傷予測方法および装置

(57)【要約】

【課題】金属配線の表面に保護膜を有する配線構造の損傷予測の提供

【解決手段】2次元有限要素解析により、金属配線の電流密度および温度分布を求めるステップ(S204)と、求めた前記電流密度および温度分布と、原子濃度分布、さらに配線材料の物性定数と配線内部応力とにより、評価対象を分割する各要素での原子流束発散を、ボイド形成寄与分とヒロック形成寄与分に分けて求めるステップ(S206~S210)と、求めた各要素の原子流束発散により、各要素の原子濃度の変化を求めるステップ(S212~S214)とを有し、各ステップを繰り返すこと(S216~S226)により、短絡又は断線故障の箇所および故障までの時間を予測する。



## 【特許請求の範囲】

【請求項 1】表面に保護膜を有する金属配線の損傷予測装置において、

有限要素解析等の数値解析法により、金属配線の電流密度および温度分布を求める手段と、

求めた前記電流密度および温度分布と、原子濃度分布、さらに配線材料の物性定数と配線内部応力とにより、評価対象を分割する各要素の原子流束発散を、ポイド形成寄与分とヒロック形成寄与分に分けて求める手段と、

求めた各要素の原子流束発散により、各要素の原子濃度の変化を求める手段とを有し、各手段の動作を繰り返すことにより、短絡又は断線故障の箇所および故障までの時間を予測することを特徴とする金属配線の損傷予測装置。

【請求項 2】請求項 1 記載の金属配線の損傷予測装置において、前記金属配線は、多結晶配線又はバンパー配線であることを特徴とする損傷予測装置。

【請求項 3】表面に保護膜を有する金属配線の損傷予測方法において、

有限要素解析等の数値解析法により、金属配線の電流密度および温度分布を求めるステップと、

求めた前記電流密度および温度分布と、原子濃度分布、さらに配線材料の物性定数と配線内部応力により、評価対象を分割する各要素の原子流束発散を、ポイド形成寄与分とヒロック形成寄与分に分けて求めるステップと、求めた各要素の原子流束発散により、各要素の原子濃度の変化を求めるステップとを有し、各ステップを繰り返すことにより、短絡又は断線故障の箇所および故障までの時間を予測することを特徴とする金属配線の損傷予測方法。

【請求項 4】請求項 3 記載の金属配線の損傷予測方法において、前記金属配線は、多結晶配線又はバンパー配線であることを特徴とする損傷予測方法。

【請求項 5】請求項 3 又は 4 に記載の金属配線の損傷予測方法において、前記配線材料の物性定数および配線内部応力は、直線状の配線を用いて、配線の基板を一定温度とし、定電流を一定時間入力して、形成されるポイド体積を求めることにより行うことを含むことを特徴とする金属配線の損傷予測方法。

【請求項 6】請求項 3 又は 4 に記載の金属配線の損傷予測方法をコンピュータに実行させるプログラムを格納した記録媒体。

## 【発明の詳細な説明】

## 【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は、半導体集積回路、プリント基板等の金属配線における寿命等の予測に関し、特に保護膜で被覆した配線の寿命等を予測する技術に関する。

## 【0002】

【従来の技術】半導体集積回路等の配線の寿命予測は、

経験式を用いて行われてきた。この経験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るために、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う、一般に精度が良いとは言えなかった。最近、発明者らによって断線故障の主要因であるエレクトロ・マイグレーション損傷（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法が開発されている。しかしながら、この方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により被覆されており、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いわれている。しかし、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は未だ特定されておらず、これを用いた断線箇所、断線寿命に関する予測法は開発されていない。一方、EM による応力の増大による保護膜の損傷は配線間の短絡故障を招くが、この信頼性（短絡箇所、寿命）に関する評価法はこれまで開発されていなかった。

## 【0003】

【発明が解決しようとする課題】本発明は、保護膜が存在する場合に EM 損傷に影響を及ぼす因子、すなわち EM に起因した配線内の原子濃度（応力）分布、保護膜により発生する配線内の熱応力、および拡散係数（活性化エネルギー）変化を考慮した EM 損傷の支配パラメータを理論的に定式化し、同パラメータを用いて、必要となる物性定数および熱応力の決定法を開発することである。そして、この支配パラメータを用いた断線予測法および保護膜破損の予測法を提供することである。

## 【0004】

【課題を解決するための手段】上記目的を達成するために、本発明は、表面に保護膜を有する金属配線の損傷予測装置又は方法において、有限要素解析等の数値解析法により、金属配線の電流密度および温度分布を求め、求めた前記電流密度および温度分布と、原子濃度分布、さらに配線材料の物性定数と配線内部応力とにより、評価対象を分割する各要素の原子流束発散を、ポイド形成寄与分とヒロック形成寄与分に分けて求め、求めた各要素の原子流束発散により、各要素の原子濃度の変化を求めて、この動作を繰り返すことにより、短絡又は断線故障の箇所および故障までの時間を予測することを特徴とする。これらの対象とする金属配線は、多結晶配線又はバンパー配線のどちらでも適用することが可能である。これにより、表面に保護膜を有する金属配線の短絡および断線の損傷を正確に予測することが可能となる。前記配線材料の物性定数および配線の熱応力は、直線状の配線を用いて、配線の基板を一定温度とし、定電流を一定時間入力して、形成されるポイド体積を求めることにより

行うことを含んでいる。このように、配線材料の物性定数および配線の熱応力も簡単に求めることができる。金属配線の損傷予測方法をコンピュータに実行させるプログラムを格納した記録媒体も本発明である。

【 0 0 0 5 】

【発明の実施の形態】本発明の実施形態を、図面を参照して詳細に説明する。本発明は、配線の内部構造が異なる2種類の配線、すなわち配線幅方向に複数の結晶粒が存在する多結晶配線と配線幅方向に単一の結晶粒が存在しないバンパー配線の各々について、保護膜の存在に

$$J = \frac{ND_0}{kT} \exp\left(-\frac{Q - \sigma_r \Omega + \frac{\kappa \Omega}{N_0}(N - N_T)}{kT}\right) \left( z^* e \rho \mathbf{j} - \frac{\kappa \Omega}{N_0} \nabla N \right) \quad (1)$$

ここで、N：原子濃度（密度）、D<sub>0</sub>：振動数項、k：ボルツマン定数、T：絶対温度、Q：活性化エネルギー、Z<sup>\*</sup>：有効電荷数、e：単位電荷、 $\rho$ ：電気抵抗率、j：電流密度ベクトル、 $\sigma_r$ ：引張りの熱応力、 $\Omega$ ：原子体積、N<sub>0</sub>：無応力状態における原子濃度（密度）、N<sub>T</sub>： $\sigma_r$ が作用したときの原子濃度（密度）、 $\nu$ ：体積弾性率である。

【 0 0 0 7 】（多結晶配線）多結晶配線内における原子拡散径路として、結晶粒界と結晶粒内が考えられるが、結晶粒内における原子の易動度は粒界におけるそれと比較し無視できるほど小さいので、結晶粒界における発散のみを考える。多結晶配線における結晶粒界を考慮するために、結晶粒界構造を平均化したモデルを導入する。図1は多結晶配線構造のモデルの例である。図1に示すように、平均結晶粒径dの( 3 ) / 6 倍の長さを持つ三本の結晶粒界で構成される三重点を、内部に一つだけ含む単位厚さの四角形要素を仮定する。同要素の面積は ( 3 ) d<sup>2</sup> / 4 である。結晶粒界IIおよびIIIは結晶粒界Iに対して対称でありその狭角は1 2 0 °に近いが、わずかな偏差2  $\theta$  が存在するものとする。

$$AFD_{gb}^R = C_{gb}^R \frac{4}{\sqrt{3}d^2} \frac{1}{T} \exp\left(-\frac{Q_{gb} + \kappa \Omega(N - N_T)/N_0 - \sigma_r \Omega}{kT}\right) \times \left\{ -\sqrt{3}\Delta\phi(j_x \cos\theta + j_y \sin\theta)Z^* e \rho - \sqrt{3}\Delta\phi \frac{\kappa \Omega}{N_0} \left( \frac{\partial N}{\partial x} \cos\theta + \frac{\partial N}{\partial y} \sin\theta \right) \right. \\ - \frac{d}{2} \Delta\phi \left[ \left( \frac{\partial j_x}{\partial x} - \frac{\partial j_y}{\partial y} \right) Z^* e \rho \cos 2\theta - \frac{\kappa \Omega}{N_0} \left( \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 N}{\partial y^2} \right) \cos 2\theta + \left( \frac{\partial j_x}{\partial y} + \frac{\partial j_y}{\partial x} \right) Z^* e \rho \sin 2\theta - 2 \frac{\kappa \Omega}{N_0} \frac{\partial^2 N}{\partial x \partial y} \sin 2\theta \right] - \frac{\sqrt{3}}{4} d \frac{\kappa \Omega}{N_0} \left( \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial y^2} \right) \\ - \frac{\kappa \Omega}{kT} \frac{N_0}{4} \left[ \frac{\sqrt{3}}{4} d \left\{ Z^* e \rho \left( j_x \frac{\partial N}{\partial x} + j_y \frac{\partial N}{\partial y} \right) - \frac{\kappa \Omega}{N_0} \left( \frac{\partial N}{\partial x} \frac{\partial N}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial y} \frac{\partial N}{\partial y} \right) \right\} - \frac{d}{2} \Delta\phi \left\{ Z^* e \rho \left( j_x \frac{\partial N}{\partial x} + j_y \frac{\partial N}{\partial y} \right) - 2 \frac{\kappa \Omega}{N_0} \frac{\partial N}{\partial x} \frac{\partial N}{\partial y} \right\} \sin 2\theta \right] \\ + \frac{\sqrt{3}d}{4T} \left\{ \frac{Q_{gb} + \kappa \Omega(N - N_T)/N_0 - \sigma_r \Omega}{kT} - 1 \right\} \left[ Z^* e \rho \left( j_x \frac{\partial T}{\partial x} + j_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \frac{\kappa \Omega}{N_0} \left( \frac{\partial N}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} \right) \right] \quad (2)$$

ここに、C<sub>gb</sub><sup>R</sup> = N D<sub>0</sub> / kである。AFD<sub>gb</sub><sup>R</sup>は原子濃度勾配の影響を受けたEMによる単位時間、単位体積あたりの原子の減少数すなわち原子流束の発散を表す。式( 2 )の右辺における< >内の第一項および第二項は結晶粒界三重点での原子流束の発散に関する項、その他の項は結晶粒界自身での原子流束の発散に関係した項である。また、AFD<sub>gb</sub><sup>R</sup>が正の値をとる場合はポイド（空隙）の形成に、負の値をとる場合はヒロック（表面の突起）の形成に寄与する。実際の配線を考えた

起因した種々の効果を考慮したEM損傷支配パラメータを特定し、さらにその各々を用いて多結晶配線及びバンパー配線における断線および保護膜破損の予測法を開発したものである。

【 0 0 0 6 】< EM損傷支配パラメータAFD<sub>gb</sub><sup>R</sup>の定式化 >まず、EM損傷支配パラメータAFD<sub>gb</sub><sup>R</sup>の定式化を説明する。保護膜による影響因子すなわち、原子濃度勾配に起因した逆拡散および配線内熱応力を考慮したEM原子流束Jは次式で与えられる。

【数 1】

【 0 0 0 8 】電流密度ベクトルjのx方向成分およびy方向成分をj<sub>x</sub>、j<sub>y</sub>、原子濃度をN、原子濃度勾配のx方向成分およびy方向成分をそれぞれ N / x、N / yとし、結晶粒界Iとx軸のなす角を  $\theta$  とすると、結晶粒界I、IIおよびIIIの端部における電流密度、温度、原子濃度、原子濃度勾配は、図1に示すように表される。これらを式( 1 )に代入することにより、それぞれの粒界端における結晶粒界に沿った原子流束が得られる。ここに要素から外に出る方向を正と定義する。結晶粒界I、IIおよびIIIの端部における原子流束に粒界の幅  $\delta$  および単位厚さを乗じることにより、それぞれの粒界端における単位時間あたりの原子の移動数を得、それらを各々加える。微小項を無視し、さらに電流保存則を用いて式を簡単化した後、要素の体積( 3 ) d<sup>2</sup> / 4 で除す。このようにして、結晶粒界Iとx軸のなす角がなる場合の結晶粒界拡散における単位時間、単位体積あたりの原子の減少数、すなわち原子流束の発散AFD<sub>gb</sub><sup>R</sup>は次のように与えられる。

【数 2】

場合、 $\theta$ は任意の値をとる。よって  $\theta$ のとり得る全ての範囲( 0 <  $\theta$  < 2  $\pi$  )を考慮した流束の発散を求める必要がある。ここでポイド形成のみに着目するものとして、 $\theta$ が0から2  $\pi$ まで変化する場合のAFD<sub>gb</sub><sup>R</sup>の正值のみの期待値を求める。ここに、AFD<sub>gb</sub><sup>R</sup>の負の値は、ポイド形成に寄与しないため、0とみなす。AFD<sub>gb</sub><sup>R</sup>とAFD<sub>gb</sub><sup>R</sup>の絶対値の和をとり、2で除すことによって、多結晶配線の結晶粒界におけるポイド形成に関する原子流束の発散AFD<sub>gb</sub><sup>R</sup>を次式のように導

出する。

【数 3】

$$AFD_{gen}^R = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \left( AFD_{gb\theta}^R + |AFD_{gb\theta}^R| \right) d\theta \quad (3)$$

【0009】(バンパー配線) 一方、バンパー配線においては、結晶粒界での原子流束の発散は無視することができることから、結晶粒内での発散のみを考慮すると、

単位時間、単位体積あたりの原子の減少数、すなわち原子流束の発散  $AFD_{lat}^R$  は次式で表される。

【数 4】

$$AFD_{lat}^R = \mathbf{div} \mathbf{J} = \frac{D_0 N}{kT} \exp \left[ - \frac{Q_{lat} - \sigma_T \Omega + \frac{\kappa \Omega}{N_0} (N - N_T)}{kT} \right] \times$$

$$\left[ \frac{1}{T} \left( \frac{Q_{lat} - \sigma_T \Omega + \frac{\kappa \Omega}{N_0} (N - N_T)}{kT} - 1 \right) \left\{ Z^* e \rho \left( j_x \frac{\partial T}{\partial x} + j_y \frac{\partial T}{\partial y} \right) - \frac{\kappa \Omega}{N_0} \left( \frac{\partial N}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial y} \frac{\partial T}{\partial y} \right) \right\} \right. \quad (4)$$

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

なお、ここでは、電流保存則を用いるとともに、微小項を無視して単純化を行っている。仮にポイド形成に寄与する  $AFD_{lat}^R$  の正值のみを抽出するとすれば、 $AFD$

$gen^R$  は次式で与えられる。

【数 5】

$$AFD_{gen}^R = \frac{1}{2} \left( AFD_{lat}^R + |AFD_{lat}^R| \right) \quad (5)$$

【0010】<物性値の導出法>

(多結晶配線) 保護膜の効果を考慮した多結晶配線における EM 損傷支配パラメーター  $AFD_{gen}^R$  に含まれる薄膜の物性に関する定数は、平均結晶粒径  $d$ 、結晶粒界間の相対角に関する定数  $\theta$ 、結晶粒界拡散における活性化エネルギー  $Q_{gb}$ 、有効電荷数  $Z^*$ 、 $C_{gb}^R = N D_0 / k$  である。電流密度および温度が一定とみなせ、扱いの容易な直線状配線中央部を対象に、これらの定数の分離について以下に示す。まず、直線状配線中央部では  $N = N_T$  とおける。ここに  $C_{gb}^R = N D_0 / k$  は本来  $N$  に関する変数であるが、配線のとり得る応力値を考えると、 $N$  の  $N_0$  からの変動は高々数%であると考えられるので、近似的に  $N = N_T = N_0$  とおけば、 $C_{gb}^R = N_0 D_0 / k$  となり薄膜に関する物性値とみなせる。また、濃度勾配  $\nabla N / x$  は配線長さに反比例するもの (Blech, I.A., J. Appl. Phys., 47-4(1976), 1203 参照) であり、配線形状に依存する値である。ここでは配線中央部で濃度分布を線形とみなし、 $\nabla N / x$  を配線形状に依存した定数として導出する。  $\theta$  については、同じ条件で同時に作製した表面が露出した配線より導出した値を用いることとする。なお、物性値の導出に必要な配線の電流密度、電流密度勾配、温度および温度勾配の分布を求めるために、実験に用いた配線を対象とした有限要素解析等の数値解析を実施する。

【0011】まず、平均結晶粒径  $d$  は、集束イオンビーム (FIB) 装置等により計測する。また活性化エネルギー  $Q_{gb}$  [ $= Q_{gb} - \tau$ ] は、次のように決定する。同一の入力電流密度  $j_1$  に対して、三種類の異なる基板温度  $T_{s1}$ 、 $T_{s2}$  および  $T_{s3}$  の下で一定時間通電する EM 加速実験を行う。ここで基板温度  $T_{s1}$  のときの配線中央部の温度を  $T_1$ 、 $T_{s2}$  のときを  $T_2$  および  $T_{s3}$  のときを  $T_3$  とし、各実験条件での配線中央部における条件を条件 1 :  $j_1$  および  $T_1$ 、条件 2 :  $j_1$  および  $T_2$ 、条件 3 :  $j_1$  および  $T_3$  とする。これに加え、 $j_1$  と異なる入力電流密度  $j_4$  に対して基板温度を調節することにより、配線中央部の温度を  $T_2$  と等しくした条件 4 :  $j_4$  および  $T_2$  でも一定時間通電する EM 加速実験を行う。通電後、それぞれについて、配線中央部付近のポイド体積を計測する。温度勾配、電流密度勾配および濃度勾配の傾きに関する項を無視した直線形状配線中央部における  $AFD_{gen}^R$  を、条件 1、2 および 3 に対して表示する。それぞれに、ポイド体積測定領域の面積、配線の厚さ、通電時間から潜伏期間を除いた正味の通電時間および原子体積を乗じる。これらと、実際に計測したポイド体積は等しいことより、例えば、条件 1 における配線中央部のポイド計測値を  $V_1$  とすると、この場合次の式が成り立つ。

【数 6】

$$V_1 = \frac{A \times t_1 \times \text{thick}}{N_0} \times \frac{4}{\sqrt{3}d^2} \times \frac{C_{sb}^R}{T_1} \exp\left(-\frac{Q_{sb}^*}{kT_1}\right) \times \left( Z^* \rho_{1j_1} - \frac{\Omega}{N_0} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \right) \times \frac{\sqrt{3}\Delta\phi}{2\pi} \left\{ \sqrt{1 - \left( \frac{a_1}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \right)^2} - \frac{a_1}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \cos^{-1} \left( \frac{a_1}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \right) \right\} \quad (6)$$

ここに

【数 7】

$$a_1 = \frac{\sqrt{3} \Omega / N_0 d}{4 k T_1} \quad (7)$$

【数 8】

$$b = \sqrt{3}\Delta\phi \quad (8)$$

A はポイド体積測定領域の面積， $Q_{gb}^* = Q_{gb} - \tau$ ， $t_1$  は温度  $T_1$  における配線の抵抗率， $t_1$  は条件 1 における通電時間から潜伏期間を除いた正味の通電時間， $\text{thick}$  は配線の厚さである。式 (6) と同様な方程式が条件 2 および 3 に対しても成り立つ。式 (6) におい

て両辺自然対数を取り、条件 1 における式から条件 3 における式を減じることにより、 $Q_{gb}^*$  と有効電荷数  $Z^*$  および原子濃度勾配  $\cdot N / x$  の関係式 (9) が得られる。

【数 9】

$$-\frac{Q_{sb}^*}{k} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_3} \right) = \ln \frac{V_1 T_1}{t_1 V_3 T_3} - \ln \frac{Z^* \rho_{1j_1} - \frac{\Omega}{N_0} \kappa \frac{\partial N}{\partial x}}{Z^* \rho_{3j_1} - \frac{\Omega}{N_0} \kappa \frac{\partial N}{\partial x}} - \ln \frac{\sqrt{1 - \left( \frac{a_1}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \right)^2} - \frac{a_1}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \cos^{-1} \left( \frac{a_1}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \right)}{\sqrt{1 - \left( \frac{a_3}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \right)^2} - \frac{a_3}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \cos^{-1} \left( \frac{a_3}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \right)} \quad (9)$$

ここに

【数 10】

$$a_3 = \frac{\sqrt{3} \Omega / N_0 d}{4 k T_3} \quad (10)$$

$t_3$  は温度  $T_3$  における配線の抵抗率， $t_3$  は条件 3 における通電時間から潜伏期間を引いた正味の通電時間である。なおここでは、 $T_1$  と  $T_3$  間の  $\tau$  の変動は微小とみなして無視した。式 (9) と同様な式が条件 1 と 2 および条件 2 と 3 においても成り立つ。一方、配線中央部の

温度が同じで電流密度が  $j_1$ ， $j_4$  と異なる条件 2 と 4 に関して式 (6) と同様な式を減じることにより、 $Z^*$  と  $\cdot N / x$  の関係式が求まる。

【数 11】

$$\frac{\Omega}{N_0} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} = \frac{\rho_2 \{V_2 j_4 - (t_2 / t_4) V_4 j_1\}}{V_2 - (t_2 / t_4) V_4} Z^* e \quad (11)$$

ここで  $\rho_2$  は温度  $T_2$  における配線の抵抗率、 $V_2$  および  $V_4$  はそれぞれ条件 2 および条件 4 におけるポイド体積測定値、 $t_2$  および  $t_4$  は条件 2 および条件 4 における通電時間から潜伏期間を引いた正味の通電時間である。式 (11) を式 (9) に代入すると、条件 1 と 3 における  $Q_{gb}^*$  ( $Q_{gb13}^*$  と表す) と  $\cdot N / x$  だけの関係式

が式 (12) のように得られる。なお、EM 損傷のしきい電流密度が実験的に求めることが可能な場合には、条件 4 は必要とせず後述の式 (14) と同様な  $Z^*$  と  $\cdot N / x$  の関係式を得ることができるので、式 (11) のかわりに用いることができる。

【数 12】

$$Q_{sb13}^* = \frac{-k}{\left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_3} \right)} \times \left[ \ln \frac{V_1 T_1}{t_1 V_3 T_3} \times \frac{\{V_2 - (t_2 / t_4) V_4\} \rho_{3j_1} - \rho_2 \{V_2 j_4 - (t_2 / t_4) V_4 j_1\}}{\{V_2 - (t_2 / t_4) V_4\} \rho_{1j_1} - \rho_2 \{V_2 j_4 - (t_2 / t_4) V_4 j_1\}} \times \frac{\sqrt{1 - \left( \frac{a_3}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \right)^2} - \frac{a_3}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \cos^{-1} \left( \frac{a_3}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \right)}{\sqrt{1 - \left( \frac{a_1}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \right)^2} - \frac{a_1}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \cos^{-1} \left( \frac{a_1}{b} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \right)} \right] \quad (12)$$

式 (12) と同様な式が、条件 1 と 2 および条件 2 と 3 の間においても成り立つので、 $Q_{gb}^*$  と  $\cdot N / x$  だけの関係式が 3 式得られることになる。ここで  $Q_{gb}^*$  は各式で同じ値をとり得るはずだから、三式間の  $Q_{gb}^*$  の偏差  $(Q_{gb13}^* - Q_{gb23}^*)^2 + (Q_{gb23}^* - Q_{gb12}^*)^2 + (Q_{gb12}^* - Q_{gb13}^*)^2$  が最も小さくなるように、適当な  $\cdot N / x$  を定めることにより、 $Q_{gb}^*$  および  $\cdot N / x$  が求まる。次いで  $Z^*$  は得られた  $\cdot N / x$

を式 (11) に代入することにより求まる。さらに、定数  $C_{gb}^R$  は条件 1，2 および 3 に対して、式 (6) における左辺のポイド体積測定値と、右辺の  $A F D_{gen}^R$  を用いた数値計算によるポイド体積が一致するように決定する。これより条件 1，2 および 3 に対してそれぞれの  $C_{gb}^R$  の値が得られるが、これらを平均したものを  $C_{gb}^R$  の値とする。また、配線内部の熱応力を見積る場合には、上記方法で得た  $Q_{gb}^*$  [=  $Q_{gb} - \tau$ ] と

保護膜のない配線を用いて得た  $Q_{gb}$  の値から  $\tau$  を見積ることができる。以上のようにすべての物性値は直線形状の配線を用いた簡単な実験から求まる。

【 0 0 1 2 】 ( バンパー配線 ) 保護膜の効果を考慮したバンパー配線における EM 損傷支配パラメータ  $A F D_{gen}^R$  に含まれる薄膜の物性に関する定数は、 $Q_{lat}$ 、 $Z^*$ 、 $D_0$  である。直線形状のバンパー配線においてポイド形成領域である同配線陰極部を対象としたこれらの定数の導出法について示す。まず式 ( 4 ) 中において直線状配線陰極部では  $N = N_T$  とおける。ここでも配線陰極部で濃度分布を線形とみなし、 $\cdot N / x$  を配線形状に依存した定数として導出する。活性化エネルギー  $Q_{lat}$  [ =  $Q_{lat} - \tau$  ] は、次のように決定する。同一の入力電流密度  $j_1$  に対して三種類の異なる基板温度  $T_{s1}$ 、 $T_{s2}$  および  $T_{s3}$  の下で一定時間通電する EM 加速実

$$V_1 = \frac{A \times t_1 \times thick}{N_0} \times \frac{D_0 N_T}{k T_1^2} \exp\left(-\frac{Q_{lat}^*}{k T_1}\right) \times \left( Z^* e \rho_4 j_{th} - \frac{\Omega}{N_0} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \right) \left\{ \left( \frac{Q_{lat}^*}{k T_1} - 1 \right) \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\Omega}{N_0 k} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \right\} \quad (13)$$

ここに、 $A$  はポイド体積測定領域の面積、 $t_1$  は温度  $T_1$  における配線の抵抗率、 $t_1$  は条件 1 における正味の通電時間、 $thick$  は配線の厚さである。式 ( 1 3 ) と同様な方程式が条件 2 および 3 に対しても成り立つ。式 ( 1 3 ) において両辺自然対数を取り、条件 1 における式から条件 3 における式を減じることにより、 $Q_{lat}^*$  有効電荷数  $Z^*$  および原子濃度勾配  $\cdot N / x$  の関係式が得られる。ところで、電流密度が小さい場合、EM

$$Z^* e \rho_4 j_{th} = \frac{\Omega}{N_0} \kappa \frac{\partial N}{\partial x} \quad (14)$$

ここに  $j_{th}$  は  $j_{th}$  作用下の陰極部の温度における抵抗率であり、 $j_{th}$  は実験的に求まる。式 ( 1 4 ) を  $Q_{lat}^*$  と有効電荷数  $Z^*$  および原子濃度勾配  $\cdot N / x$  の関

$$\kappa \frac{\partial N}{\partial x} = \frac{\frac{V_1 T_1^2}{t_1 V_3 T_3^2} \times \frac{\rho_3 j_1 - \rho_4 j_{th}}{\rho_1 j_1 - \rho_4 j_{th}} \left( \frac{Q_{lat13}^*}{k T_3} - 1 \right) - \exp\left\{ -\frac{Q_{lat13}^*}{k} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_3} \right) \right\} \left( \frac{Q_{lat13}^*}{k T_1} - 1 \right)}{\frac{V_1 T_1^2}{t_3 V_3 T_3^2} \times \frac{\rho_3 j_1 - \rho_4 j_{th}}{\rho_1 j_1 - \rho_4 j_{th}} \left( \frac{Q_{lat13}^*}{k} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_3} \right) \right) - \exp\left\{ -\frac{Q_{lat13}^*}{k} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_3} \right) \right\}} \cdot \frac{N_0 k \partial T}{\Omega \partial x} \quad (15)$$

ここに条件 1 と 3 で定まる  $Q_{lat13}^*$  を  $Q_{lat13}^*$  とおいた。また、 $t_3$  は条件 3 における正味の通電時間である。式 ( 1 5 ) と同様な式が、条件 1 と 2 および条件 2 と 3 の間においても成り立つので、 $Q_{lat}^*$  と  $\cdot N / x$  だけの関係式が 3 式得られることになる。ここで  $\cdot N / x$  は各式で同じ値をとるはずであるから、3 式間の  $\cdot N / x$  の偏差 (  $\cdot N / x_{23} - \cdot N / x_{13}$  )<sup>2</sup> + (  $\cdot N / x_{23} - \cdot N / x_{12}$  )<sup>2</sup> + (  $\cdot N / x_{12} - \cdot N / x_{13}$  )<sup>2</sup> が最も小さくなるように、適当な  $Q_{lat}^*$  を定めることにより、 $Q_{lat}^*$  および  $\cdot N / x$  が求まる。ここに、条件 1 と 3 で定まる  $\cdot N / x$  を  $\cdot N / x_{13}$ 、条件 2 と 3 で定まる  $\cdot N / x$  を  $\cdot N / x_{23}$ 、条件

験を行う。ここで基板温度  $T_{s1}$  のときの配線陰極部の温度を  $T_1$ 、 $T_{s2}$  のときを  $T_2$  および  $T_{s3}$  のときを  $T_3$  とし、各実験条件での配線陰極部における条件を条件 1 :  $j_1$  および  $T_1$ 、条件 2 :  $j_1$  および  $T_2$ 、条件 3 :  $j_1$  および  $T_3$  とする。通電後それぞれについて、配線陰極部のポイド体積を計測する。 $^2 N / x^2 = 0$  と仮定した直線形状配線陰極部における  $A F D_{gen}^R$  を、条件 1、2 および 3 に対して表示し、それぞれにポイド体積測定領域の面積、配線の厚さ、通電時間から潜伏期間を除いた正味の通電時間および原子体積を乗じる。これらと実際に計測したポイド体積を等値することより、例えば条件 1 における配線陰極部のポイド体積計測値を  $V_1$  とすれば、次式が成り立つ。

【 数 1 3 】

による原子流束と濃度勾配による逆拡散はちょうど釣り合い、みかけの原子流束が零となるため EM 損傷が生じないが、ある電流密度を超えると EM による原子流束が濃度勾配による逆拡散に勝り、EM 損傷が生じる。このときのしきい電流密度を  $j_{th}$  とする。陰極部において式 ( 6 ) が零となる時、次式のような  $Z^*$  と  $\cdot N / x$  の関係が成り立つ。

【 数 1 4 】

係式に代入することにより、 $\cdot N / x$  と  $Q_{lat}^*$  の関係を次式のように得る。

【 数 1 5 】

1 と 2 で定まる  $\cdot N / x$  を  $\cdot N / x_{12}$  とおいた。次いで、 $Z^*$  は得られた  $\cdot N / x$  を式 ( 1 4 ) に代入することにより求まる。さらに、定数  $D_0$  は  $N_T = N_0$  とし、式 ( 1 3 ) における左辺のポイド体積計測値と、右辺の  $A F D_{gen}^R$  を用いた数値計算によるポイド体積が、一致するように決定する。また、配線内部の熱応力を見積る場合には、上記方法で得た  $Q_{lat}^*$  [ =  $Q_{lat} - \tau$  ] と保護膜のない配線を用いて得た  $Q_{lat}$  値から  $\tau$  を見積ることができる。以上のように、すべての物性定数は直線形状の配線を用いた簡単な実験から求まる。

【 0 0 1 3 】 < 断線過程のシミュレーション > 本発明におけるシミュレーションは、予測対象の配線を要素分割

10

30

40

50

し、各々の要素厚さを  $AFD_{gen}^R$  に基づき減少させることにより、断線過程をシミュレーションするものである。ここで、多結晶配線の場合は、結晶粒界に沿ってスリット状に成長するというボイドの成長形態を考慮し、実験・観察より得た配線の平均結晶粒径および平均スリット幅に基づき配置した、スリット状要素のみで要素厚が減少するものとする。一方、バンパー配線の場合にはスリット状要素の設置は必要ない。図 2 に多結晶配線 100 の要素分割の一例を示す。多結晶配線の場合を例にとって、断線過程のシミュレーション処理を図 3 に示すフローチャートで説明する。まず、配線の電流密度分布および温度分布を、有限要素解析等の数値解析により求める (S204)。各要素の  $AFD_{gen}^R$  の値は、これらの分布と予め加速試験から決定した薄膜の物性値を用いて計算する (S206)。各要素の  $AFD_{gen}^R$  に計算に用いる原子濃度の初期値は、このルーティンの最初に与えられている (S202)。この際、ボイド形成に寄与する  $AFD_{gb}^R$  の正值に着目した  $AFD_{gen}^R$  値と、ヒロック形成に寄与する  $AFD_{gb}^R$  の負値のみに着目した  $AFD_{gen}^R$  値の双方について計算する。シミュレーションの 1 ステップにおける各要素の金属原子数の変化量は、要素の体積および 1 ステップの時間を各々の  $AFD_{gen}^R$  に乗じることによりボイド形成寄与分とヒロック形成寄与分に分けて求める (S208)。さらに、これを用いて各要素における濃度初期値  $N_0$  からの濃度の変化量をボイド及びヒロック形成寄与分に分けて求める (S210)。次に、これらを加えることにより各要素の濃度  $N$  を求め (S214)、配線全体の濃度分布を得る。ここで、濃度の値がボイドの形成に至る臨界値  $N_{min}$  を下まわるか、ヒロックの形成に至る臨界値  $N_{max}$  を上まわるかの判定を行い (S216)、この範囲内の場合 (S216 で Yes) は、EM 損傷の潜伏期間として、得られた原子濃度を用いて再度  $AFD_{gen}^R$  値の計算を行い、以降の計算を繰り返す。一方、シミュレーションの進行に伴い、濃度が  $N_{min}$  から  $N_{max}$  の範囲を超えた場合は (S216 で No)、EM 損傷の進行期間として、ボイド形成に寄与する原子濃度変化量より算出した原子の減少量に応じ、スリット状要素の厚さを減少させる (S220)。その際、スリット状要素とその両隣の要素の濃度変化量を用いて、スリット状要素の厚さを減少させるが、バンパー配線の場合にはこの処理は必要ない。

【0014】ここで、 $N_{min}$ 、 $N_{max}$  の値および 値は、加速試験の結果から次のようにあらかじめ決定しておく。まず、直線形状配線を用いた加速試験により、ある条件下の潜伏期間および配線中央部での  $N/x$  の値を得る。次に同様な条件下で先のシミュレーションの潜伏期間に関する部分のみを行い、加速試験で得た潜伏時間後に  $N/x$  が等しくなるように 値を決定する。さらに、その時点での濃度  $N$  の最大値を  $N_{max}$

値、最小値を  $N_{min}$  値とする。なお、予め数値計算や実験計測などにより 値が既知の場合には、この 値を用いて試験で得た潜伏期間分のシミュレーションを行い、その時点での濃度  $N$  の最大値を  $N_{max}$  値、最小値を  $N_{min}$  値とする。逆に  $N_{max}$ 、 $N_{min}$  が既知の場合には、潜伏期間のシミュレーションを行い、潜伏期間後の  $N_{max}$  あるいは  $N_{min}$  が既知の値と一致するように 値を決定することができる。厚さの減少した要素においては、厚さの減少量に対応した深さのボイドが形成されたものとみなす (S220)。各要素の厚さを考慮して (S226)、再度、電流、温度の有限要素解析等の数値解析を行う。以上の計算を繰返し、融点を越えた温度の要素または、厚さがしきい値以下の要素が配線幅にわたって繋がった状態を断線と定義し (S222)、シミュレーションを終了する (S224)

【0015】<短絡故障のシミュレーション>短絡故障のシミュレーションは、前に説明した図 3 のフローチャートの処理で潜伏期間のみの計算を行うものである。即ち、ステップ S216 において、濃度  $N$  が  $N_{max}$  を上まわった時点で保護膜の破壊が生じたものとして計算を終了する。 $N_{max}$  値は前節と同様な方法で与えることができるが、加速試験の保護膜と予測対象のそれが異なる場合や予測精度を上げる場合には、数値計算や実験計測などにより、 値および保護膜の破壊強度あるいは破壊靱性を求め、そのときの応力値と 値から  $N_{max}$  の値を決定して与える。保護膜の破壊は短絡故障の以前に生じるものであり厳密には異なるが、第一近似的に保護膜の破壊時点を短絡故障の時点とした。

【0016】本発明の保護膜を有する金属配線の EM 損傷予測を行うプログラムを格納した記憶媒体から、プログラムをシステムで読み出して実行することにより、本発明の構成を実現することができる。この記録媒体には、フロッピー (登録商標)・ディスク、CD-ROM、磁気テープ、ROM カセット等がある。上述した本発明の保護膜を有する金属配線の EM 損傷予測を行うために用いるシステムとしては、スタンド・アローンのコンピュータ・システムばかりではなく、複数のシステムから構成される例えばクライアント・サーバ・システム等を用いてもよい。

【0017】

【実施例】以下に、上述の物性値の導出および断線等の予測の具体的な実施例として、以下に説明する。  
<多結晶配線における支配パラメータに含まれる物性値の導出> 図 4 は、上述の考え方で物性定数を実際に求めた Al 薄膜配線 100 の寸法形状を示す。図 4 に示すように、表面に酸化膜を形成した Si 基板上に、Al 薄膜配線を形成後、その表面にポリイミド樹脂膜を被覆したサンプルを作製した。この配線に対して上述の物性値の導出法に従って EM 加速試験を行った。作成した配線は 2 種類で、Sample L: 幅 (W) 8.6  $\mu\text{m}$ 、長さ

( L ) 8 2 μ m と、 S a m p l e S : 幅 ( W ) 8 . 7 μ m、長さ ( L ) 3 2 μ m である。 E M 加速試験は、図 5 に示すような構成を有する装置 3 0 0 を用いて行った。活性化エネルギー導出のため、基板 3 6 0 の温度を、ホットステージ 3 5 0 を用いて、 4 5 8 , 4 7 3 , 4 8 5 K の三種類の温度のいずれかに保持している。配線部 1 0 0 における電流密度が約 5 . 5 M A / c m<sup>2</sup> になるような定電流を、定電流源 3 1 0 から一定時間入出力させることに加え、配線中央部の温度が基板温度 4 7 3 K のときの配線中央部の温度と同じくなるように、基板温度を 4 1 5 K に保持して、配線部における電流密度が S a m p l e L で 8 . 5 M A / c m<sup>2</sup> , S a m p l e S で 9 . 0 M A / c m<sup>2</sup> になるような定電流を、プローブ 3 7 2 および 3 7 4 から一定時間入出力した。いずれの条件に

対しても 2 5 本の試験片を用いた。全ての通電終了後、保護膜を除去し、電界放出型電子顕微鏡 ( F E - S E M ) 4 0 0 により配線の中央部領域を観察した。得られた S E M 像を画像解析することにより、ポイドの総面積を計測し、ポイドの面積に膜厚を乗じることにより、配線中央部におけるポイド体積を推定した。

【 0 0 1 8 】保護膜の効果を検討した E M 損傷支配パラメータ  $A F D_{g_{en}}^R$  を表面に保護膜を有する配線に適用し、 S a m p l e L および S a m p l e S のそれぞれに対して  $A F D_{g_{en}}^R$  に含まれる物性値導出を行った。得られた物性値  $Q_{gb}^*$  ,  $Z^*$  ,  $C_{gb}^R$  ならびに  $\kappa \cdot \partial N / \partial x$  の値を表 1 にまとめて示す。

【表 1】表 1  $A F D_{g_{en}}^R$  に含まれる物性値

	$Q_{gb}^*$ [eV]	$Z^*$	$C_{gb}^R$ [KJs]	$\kappa \cdot \partial N / \partial x$ [J/μm]
SampleL	0. 5 4 4	- 3. 5 7	$3. 9 0 \times 1 0^{37}$	- 2. 7 9
SampleS	0. 5 0 6	- 2. 6 3	$5. 3 7 \times 1 0^{37}$	- 3. 3 6

表 1 から分かるように、 S a m p l e L と S a m p l e S の形状の違いによらず、  $Q_{gb}^*$  ,  $Z^*$  ,  $C_{gb}^R$  の各値はほぼ同様であった。つまり、いずれも形状によらない物性値として機能しているといえる。また、配線内の応力 ( 濃度 ) 勾配は配線長さに反比例すると言われているが、表 1 において、  $\kappa \cdot \partial N / \partial x$  の値は反比例はしていないものの、配線長さが短い方が 1 . 2 倍程度大きくなっている。  $Q_{gb}^*$  および  $Z^*$  について得られた値は、 A l 薄膜におけるこれまで報告されている値の間にあり妥当であるといえる。以上から、表面に保護膜を有する配線に  $A F D_{g_{en}}^R$  を適用した場合、保護膜の効果的捉え、配線形状に依存しない物性値および形状に依存する濃度勾配を的確に導出することができた。

【 0 0 1 9 】一方、  $A F D_{g_{en}}^R$  を保護膜を有する配線と同形状の、表面に保護膜が無い配線に適用した場合、得られた活性化エネルギー  $Q_{gb}^*$  ( =  $Q_{gb}$  ) は S a m p l e L と同形状の配線 ( 以下 S a m p l e L 1 と示す ) で 0 . 5 4 7 e v、 S a m p l e S と同形状の配線 ( 以下 S a m p l e S 1 と示す ) で 0 . 5 4 9 e v であった。保護膜を有する配線の活性化エネルギーと保護膜がない配線の活性化エネルギーを比較すると、保護膜を有する配線のほうが S a m p l e L , S a m p l e S 共に小さくなっている。もし、界面拡散の影響が大きいとすると、活性化エネルギーは大きくなるはずであるが、活性化エネルギーは保護膜を有する配線で小さくなっているため、保護膜被覆に伴う界面拡散の E M 損傷への影響は小さいと考えられる。また、  $Q_{gb}^* = Q_{gb} - \tau$  より、 S a m p l e L および S a m p l e S のそれぞれで熱応力を見積ったところ、それぞれから得た熱応力は、 S a m p l e L で 2 9 M P a であり、 S a m p l e S で 4 1 5 M P a で

あった。

【 0 0 2 0 】 ( 断線予測 ) 図 4 に示す直線形状の A l 配線を断線予測の対象として想定する。試験片の物性値は、作製した試験片を用いた加速試験により得られた、表 1 の値を用いた。ただし、ここでは一般的に知られている値を用いた。断線予測においては、図 4 に示す、 S a m p l e L の値を持つ配線形状で、入力電流密度 : 5 . 5 M A / c m<sup>2</sup>、基板温度 : 4 7 3 K の動作条件で使用した場合を想定した。図 6 に断線予測の結果を図示する。図 6 に示すように、陰極側に損傷が起こることを示している。本シミュレーションによる予測では、配線陰極部付近における 3 5 4 1 5 s e c での断線を予測した。以上のように、保護膜を有する配線の寿命、および断線箇所についても予測が可能であった。

【 0 0 2 1 】

【発明の効果】上述した本発明により、実際の配線構造により即した、保護膜を有する配線を対象とした高精度な断線 ( 断線箇所、寿命 ) 予測および配線を被覆する保護膜の破損 ( 短絡箇所、寿命 ) 予測が可能となる。また、保護膜を有する配線のための E M 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、集積回路を設計する上での保護膜及び配線材料の選択や強度評価の指標を与えることが可能となる。

【図面の簡単な説明】

【図 1】多結晶配線構造のモデルの例を示す図である。

【図 2】多結晶配線の要素分割の例を示す図である。

【図 3】多結晶配線の場合の断線過程のシミュレーション処理を示すフローチャートである。

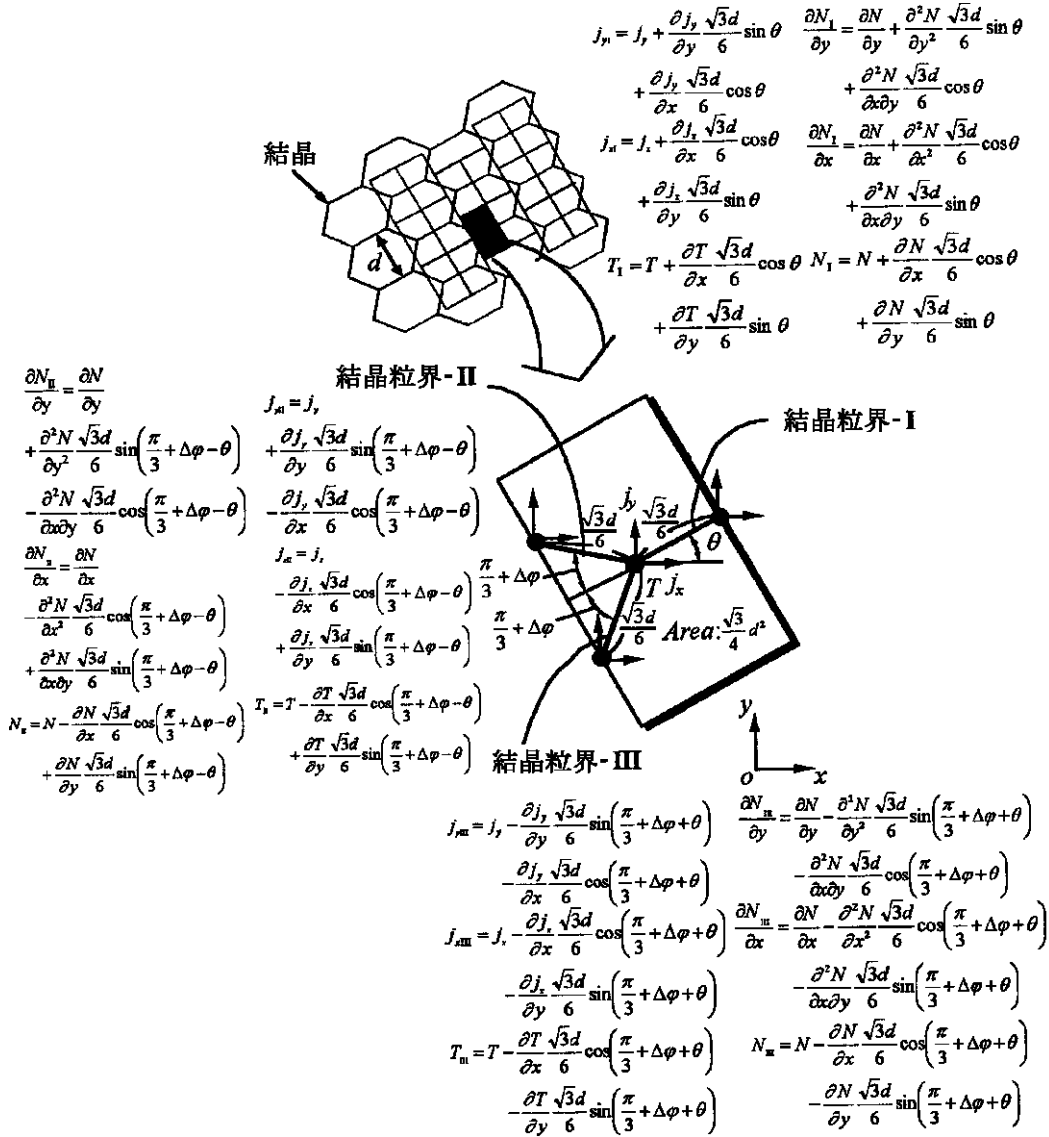


【 図 4 】 物性定数を求めた寸法形状を示す図である。

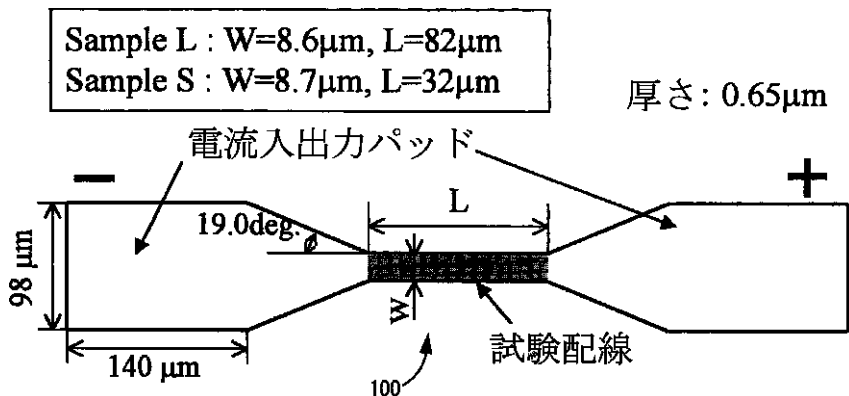
【 図 6 】 断線予測の結果を図示した図である。

【 図 5 】 E M 加速試験を行う装置構成を示す図である。

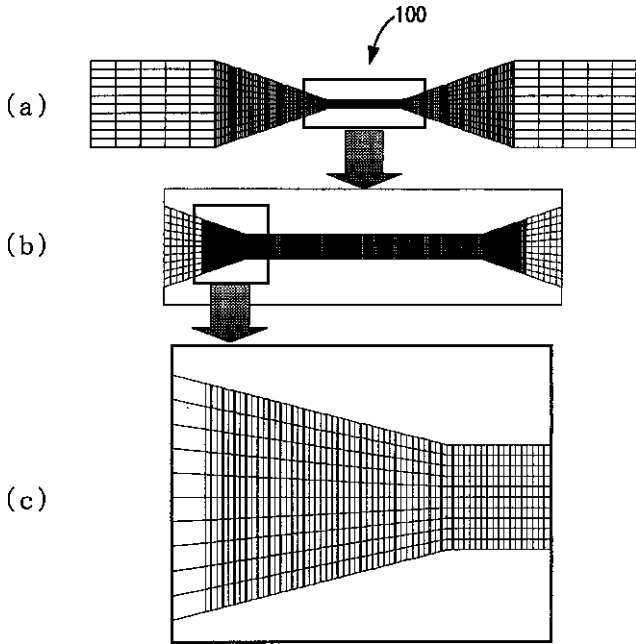
【 図 1 】



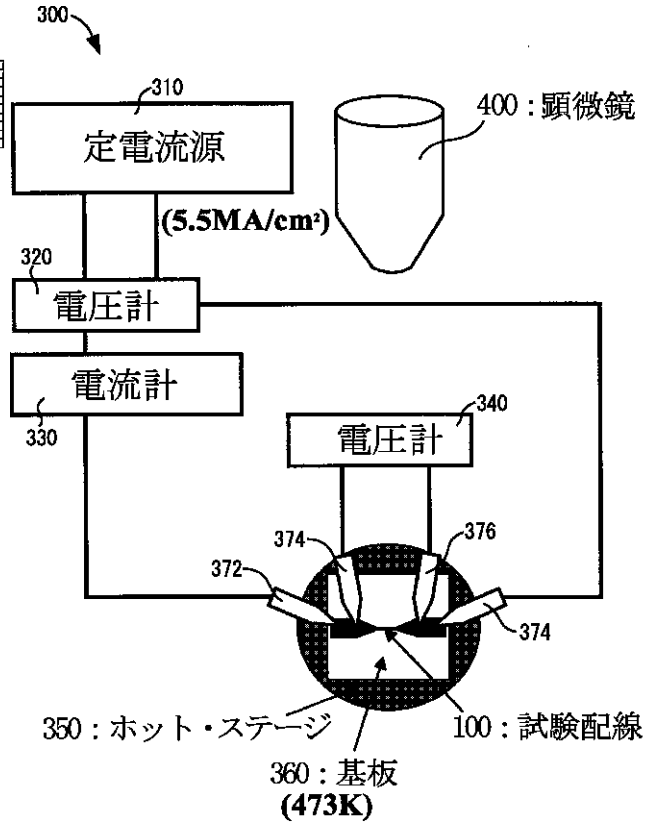
【 図 4 】



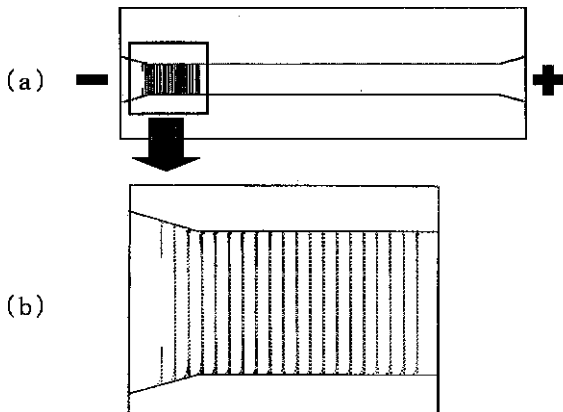
【図 2】



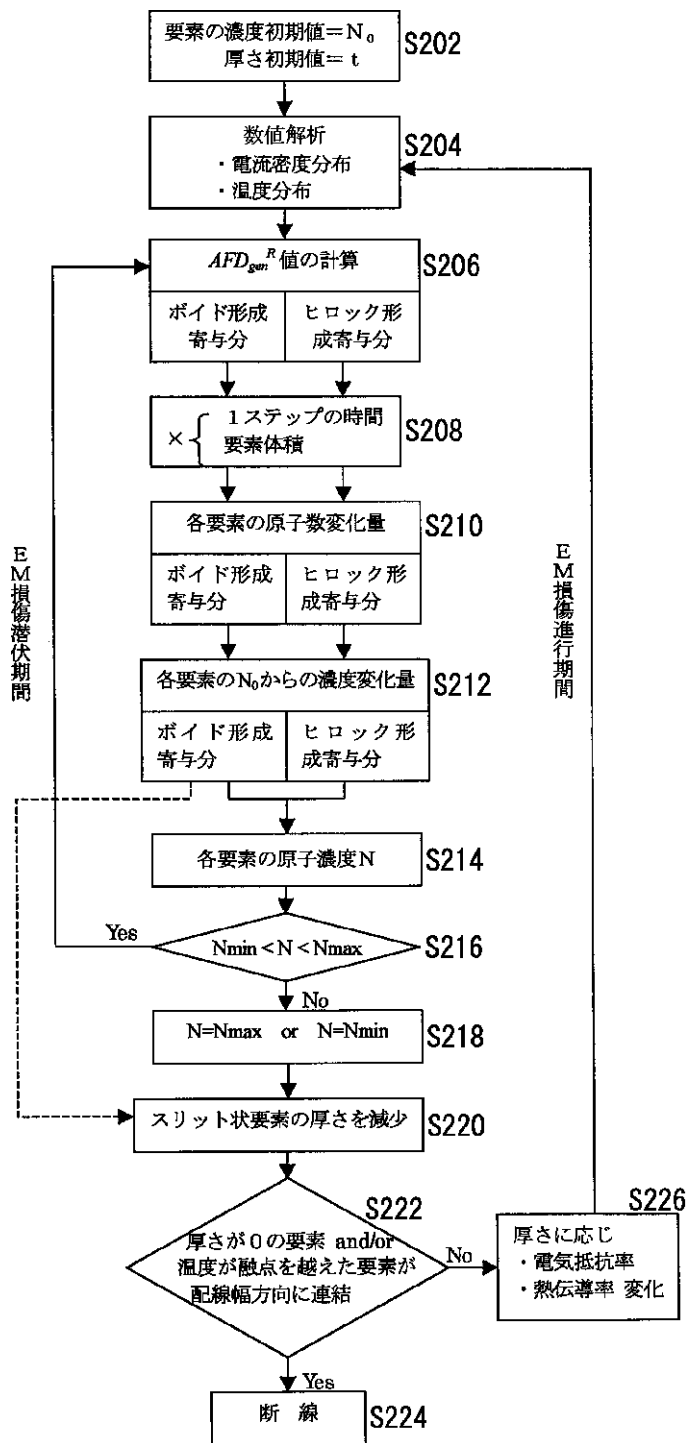
【図 5】



【図 6】



【 図 3 】



フロントページの続き