636 エレクトロマイグレーション損傷支配パラメータを用いた 表面に保護膜を有する多結晶配線の断線予測法

Prediction Method of Electromigration Failure in Passivated Polycrystalline Line by Using Governing Parameter of Electromigration Damage

正 笹川 和彦 (弘前大) 〇学 長谷川 昌孝 (東北大院)
正 坂 真澄 (東北大) 正 阿部 博之 (東北大)

Kazuhiko SASAGAWA, Hirosaki University, Bunkyo-cho 3, Hirosaki 036-8561
Masataka HASEGAWA, Tohoku University, Sendai 980-8579
Masumi SAKA, Tohoku University
Hiroyuki ABÉ, Tohoku University, Sendai 980-8577

Key Words: Electromigration Failure, Prediction Method, Governing Parameter, Passivated Polycrystalline Line

1. 緒言

半導体デバイスの高集積化に伴い、微細化された金属薄膜配線においては高密度電流およびそれに伴うジュール熱の上昇に起因してエレクトロマイグレーション(以下 EM と略す)損傷が問題になっている。半導体デバイスの信頼性確保のためには、EM 損傷を的確に予測することが肝要である。

従来、配線の寿命予測には経験式が用いられており、これには試験環境や配線形状などに依存した定数が含まれるため、普遍的な断線予測ができない状況にあった。Sasagawa らは、多結晶配線およびバンパー配線の組織構造を考慮に入れた EM 損傷の支配パラメータ AFD_{gen} を提案し⁽¹⁾、 AFD_{gen} を用いた断線過程の数値シミュレーション手法に基づいた断線予測法を開発している⁽²⁾。しかしながらこれらの研究は保護膜のない表面の露出した配線を対象にしており、実際に多用される保護膜により被覆された配線を対象としていなかった。保護膜で被覆された配線においては、EM 誘起の原子濃度勾配による EM とは逆方向の拡散や保護膜形成に伴う配線内の熱応力、保護膜—配線界面の拡散が配線の EM 損傷に影響を及ぼすと考えられる。最近、それらの影響を考慮に入れた EM 損傷の支配パラメータ AFD_{gen}^R が定式化され、実験による同支配パラメータに含まれる物性値の導出を通してパラメータの妥当性が検証された⁽³⁾。

本研究では、文献(3)で得られた物性値を用い、EM 損傷の支配パラメータ AFD_{gen}^R を用いたボイドの形成、成長から断線に至る過程の数値シミュレーション手法による表面に保護膜を有する多結晶配線の断線予測法を提案する。さらに本研究では、一例として直線形状の多結晶配線を対象に本予測法を適用し、寿命、断線箇所の予測を行う。

2. 保護膜を有する場合の EM 損傷支配パラメータ

EM 損傷の支配パラメータ AFD_{gen}^R は、EM による原子流束 $|J|$ が次式で表されることに基づいている。

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

ここに N : 原子濃度 (密度)、 D_0 : 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、 σ_T : 引張りの熱応力、

κ : 体積弾性率、 Ω : 原子体積、 N_0 : 無応力状態における原子濃度 (密度)、 N_T : σ_T が作用したときの原子濃度 (密度)、 Z^* : 有効電荷数、 e : 単位電荷、 ρ : 電気抵抗率、 j : 電流密度である。多結晶配線においては結晶粒界での拡散が支配的であるため、結晶粒内での拡散を無視すれば、EM による単位時間、単位体積あたりの原子の減少量、すなわち原子流束の発散を表す AFD_{gen}^R は次式のように表される。

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

ここに式(2)ではボイド形成に寄与する $AFD_{gb\theta}^R$ の正值のみを抽出している。なお、 $AFD_{gb\theta}^R$ は本頁下式(3)のように表すことができる。式 (3) において $C_{gb}^R = \delta D_0 / k$ 、 d : 平均結晶粒径、 Q_{gb} : 粒界拡散の活性化エネルギー、 $\Delta\phi$: 粒界間の角度に関する定数、 j_x, j_y : 電流密度ベクトルの直角座標系 x, y 方向成分であり、 θ は結晶粒界ユニット⁽¹⁾と x 軸との角度である。

3. 断線過程の数値シミュレーション

本シミュレーションは、予測対象の配線を要素分割し、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模擬するものである。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⁽²⁾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。図 1 に多結晶配線の要素分割の一例を示す。

計算の流れを図 2 に示す。まず、配線の電流密度分布および温度分布を二次元有限要素解析により求める。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。この際、ボイド形成に寄与する $AFD_{gb\theta}^R$ の正值に着目した AFD_{gen}^R 値と、ヒロック形成に寄与する $AFD_{gb\theta}^R$ 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 値に乘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。次にこれらを加

$$\begin{aligned} AFD_{gb\theta}^R = & C_{gb}^R N \frac{4}{\sqrt{3}d^2} \frac{1}{T} \exp\left\{-\frac{Q_{gb} + \kappa\Omega(N - N_T)/N_0 - \sigma_T \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] \\ & \left. + \frac{\sqrt{3}d}{4T} \left\{ \frac{Q_{gb} + \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\} \end{aligned} \quad (3)$$

Fig. 1 An example of finite element mesh

えた後、各要素の濃度 N を求め、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} からヒロックの形成に至る臨界値 N_{max} の範囲内か否かの判定を行い、この範囲内の場合は EM 損傷の潜伏期間として再度 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 EM 損傷の進行期間として、ボイド形成に寄与する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。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。

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。各要素の厚さを考慮して再度、電流、温度の二次元有限要素解析を行う。以上の計算を繰返し、融点を超えた温度の要素、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、シミュレーションを終了する。

4. 断線予測

図 3 に示す直線形状の Al 配線を断線予測の対象として想定する。物性値を求める実験には Al 薄膜配線を用いた。表面に酸化膜を有する Si 基板上に Al 薄膜を蒸着し、673K でアニールした後、ウェットエッチングにより予測で想定した形状のパターンを形成した。さらにポリイミド薄膜を塗布後熱処理して保護膜を形成した。このように作製した試験片を用いて加速通電試験を行い、物性値を決定した⁽³⁾。なお κ は配線周囲がポリイミド樹脂膜で覆われていると想定して算出した値を用いた。

断線予測においては図 3 の配線を同図に示す動作条件（入力電流密度：5.5MA/cm²、基板温度：473K）で使した場合を想定した。図 4 に断線予測の結果を示す。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通電開始後 1362 s での断線を予測した。

5. 結 言

保護膜を有する配線の EM 損傷支配パラメータ AFD_{gen}^R を用いた断線予測法を提案した。一例として Al 直線形状配線を対象とした配線寿命および断線箇所の予測を行った。

参考文献

- (1)Sasagawa, K., et al., *Trans. ASME, J. Elect. Pack.*, **120**-4(1998), 360.
- (2)Sasagawa, K., et al., *J. Appl. Phys.*, **86**・11(1999), 6043.
- (3)笹川、ほか 4 名、日本機械学会 2000 年度 年次大会講演論文集、No.00-1(2000), 25.

Table 1 Material constants

Q_{gb}^* [eV]	Z^*	C_{gb}^R [K· μm^3 /Js]	κ [GPa]
0.544	-3.57	3.24×10^{26}	4.10

Fig. 2 Computational procedure for the numerical simulation

Fig. 3 Line shape and operating condition

Fig. 4 Prediction result