解説

半導体デバイス製造における信頼性設計

Reliability Design of Thin Film Processes for Semiconductor Devices

渡邊 道弘

Michihiro WATANABE

◎1944年11月生まれ
◎1974年京都大学大学院工学研究科博士課程修了。同年(株)日立製作所入社。研究・専門テーマは情報機器およびデバイスの開発
◎正員, (株)日立製作所 機械研究所 (〒300 土浦市神立町 502)

三浦 英生

Hideo MIURA

◎1958年6月生まれ
◎1983年東北大学大学院工学研究科修士課程修了。同年(株)日立製作所入社。研究・専門テーマは半導体強度信頼性設計
◎正員, (株)日立製作所 機械研究所 (〒300 土浦市神立町 502)

1. はじめに

半導体製品開発においては、物理、電気あるいは化学的な分野の技術開発とともに、機械的な分野、すなわち構造・強度信頼性に関する技術開発の重要性が急速に増している。これは、製品の高機能化、高集積化の進展に伴い、製品構造が複雑化していること、構造が小形・薄形化するとともに、薄膜加工技術が化学的な加工（ウェットエッチング）から物理的な加工（ドライエッチング）に進歩し、角部形状が鋭角化しているために、構造端部の応力集中の影響が相対的に大きくなり、機械的な損傷が多発しやすくなっているためである。さらに、薄膜材料の多様化に伴う異種材料界面の増加も、応力増の一因となっている（図1、表1参照）。

製品の信頼性に重大な影響を与える機械的不良としては、薄膜の割れやはがれ、あるいは単結晶シリコンウェーハ内の転位発生等がある。特に、転位の発生は半導体中の電気の漏れ経路となることから、確実に防止しなければならない不良（欠陥）である。

これまで、半導体製品の設計には機械的な信頼性設計という概念はほとんど取り込まれてはいなかった。したがって、このような不良が発生した場合には、製造現場で試行錯誤を繰り返すことで、対症的な対策が行われていた。しかし、製品の多様化と製造工程数の増加に伴い、不良対策に要する時間、コストが急増する傾向にあ

り、機械的な信頼性設計技術の確立が望まれるようになってきている。

設計対象が半導体という新しい製品分野でも、基本的な信頼性設計へのアプローチ法は、従来の構造物に対するものと同じである。応力解析技術、応力測定技術および材料強度評価（測定）技術を有機的に統合して、製品固有の設計技術を開発していくわけである。ただ、解析あるいは実験の対象寸法がナノメートルからマイクロメートルという微小な世界に限定されるということで、新しい技術開発が要求されてくる。そこで、本報では、薄膜プロセスを駆使した半導体デバイスの製造工

図1 半導体デバイス構造概念図

表1 代表的な構成材料

構 造	薄 膜 材 料
電 極	Si, W, WSi
配 線	Al, Cu, Ti, TiN, MoSi, TiSi, CoSi
絶縁膜	SiO ₂ , SiN
保護膜	ポリイミド

程を対象にした、信頼性設計技術開発の状況を紹介する。

2. シミュレーション技術

半導体デバイスの製造は、高純度シリコン単結晶の育成から始まる。最近では直径 20 cm のウェーハが製造に使用されており、この結晶育成時の、転位等の結晶欠陥発生防止が最も重要な設計項目のひとつとなっている。単結晶は、シリコンを溶融し、種結晶を用いた固液界面からの結晶成長を利用した引き上げ法〔チョクラルスキー (CZ) 法〕を使用して製造される。この時の固液界面近傍から結晶内の温度分布制御が結晶内部の熱応力状態を決定し、ひいては転位発生の有無を決定する。このため、この単結晶育成過程における熱⁽¹⁾および応力シミュレーション⁽²⁾技術の開発が重要な課題となっている。

半導体デバイスの製造は、こうして作られた単結晶シリコンウェーハ上で薄膜のたい積とその部分除去（エッチング）を繰り返すことで進められる。一般に、薄膜のたい積は数百℃以上の温度で行われることが多い。この薄膜形成過程における応力シミュレーションを行う場合には、図 2 に示

したように時間とともに構造全体の形状と材料構成および温度が複雑に変化することに対応しなければならない。有限要素法を応用して解析を行う場合には、要素の生成（薄膜のたい積）と消滅（エッチング）に伴う界面、あるいは境界条件の設定変更、あるいはヤング率、熱膨張係数等の材料定数の熱履歴依存性等を考慮しなければならない。さらに、薄膜たい積過程で発生する“真性応力”の取り扱いも重要な課題である⁽³⁾。

さらに、化学反応と応力解析を連成させなければならない場合がある。例えば、酸化反応を応用してシリコン酸化膜を形成する場合、反応過程の拡散定数や界面反応定数の活性化エネルギーが、薄膜内部応力の影響を受けて変化することが明らかになっている。この場合には、反応の進行に伴う形状変化、形状変化に伴う応力変化、および化学反応定数の変化を連続して解析していく技術開発が不可欠となっている⁽⁴⁾。

半導体デバイスの製造工程数は数百に達する場合もあり、以上のような解析技術を統合したシミュレーション技術開発が活発に進められている⁽⁵⁾。薄膜の膜厚もナノメートルの領域に入りつつあることから、今後は分子動力学を応用したシミュレーション技術⁽⁶⁾⁽⁷⁾の開発も必要になるものと考えられる。

3. 薄膜強度物性測定技術

応力シミュレーションを進める上では、材料定数の精度が解析精度を決定するといっても過言ではない。材料を薄膜化した場合に、各定数がバルク材料の値をそのまま使用できるか否かは、必ずしも明らかにはなっていない。このため、薄膜の強度物性を測定する技術開発も必要になっている。具体的には、微小硬度計や超音波を応用した方法、パルジ法と呼ばれる薄膜の球殻変形挙動を測定して、各材料定数を測定する方法⁽⁸⁾などがある。ヤング率、熱膨張係数等は、バルク材料と同等の値が得られる場合と、大きく異なる場合が、各種材料においてそれぞれ測定されており、材料定数の発現メカニズムを含めて今後の興味深い検討課題となっている。

さらに、薄膜の強度物性として重要な概念に薄

図 2 有限要素法を応用した応力解析例

膜のたい積過程で発生する“真性応力”がある。この真性応力とは、薄膜の結晶構造が熱力学的に安定な構造から“ひずんで”いるために発生する応力で、薄膜のたい積温度や膜をたい積する基板材質、あるいは膜のたい積雰囲気（ガス種、圧力等）に強く依存して変化する。現在のところ発生メカニズムは明確にはなっていないが、1000 MPa を越える値を有することが多いため、実測により正確に把握しておかないと、応力解析結果が大きく変動してしまう場合がある。

さらに、薄膜の熱処理過程においては、膜の体積収縮、化学反応あるいは相変態に基づく体積変化に起因して、大きな応力変動が生じる場合もあり⁽⁹⁾、材料力学的にも薄膜の強度物性研究は、興味をそそる問題が山積している状態である。

以上のような薄膜強度物性の発生メカニズム解明は、薄膜の低応力化を進める上では、薄膜製造装置の改良あるいは新しい装置の開発にもつながる場合があり、製造装置開発者にとっても関心の高いテーマになるものと考えられる。

4. 応力測定技術

応力シミュレーション結果の妥当性検証という意味でも、マイクロメータ以下の領域の応力測定技術の開発も不可欠となっている。X線あるいは電子線回折あるいはレーザ光を利用した応力/ひずみ測定技術開発が、活発に進められている。X線の照射ビーム経はマイクロメータオーダまで絞り込むことが可能となっており、結晶材料の局所ひずみ測定に活用され始めている⁽¹⁰⁾。電子線回折は、透過電子顕微鏡を利用してナノメータの領域のひずみ測定が可能である。試料の加工に伴う応力の再配分の影響等を考慮しなければならない場合もあるが、極微領域のひずみ測定技術として今後の発展が望まれる。

半導体材料のひずみ測定には、レーザラマン法の利用も有効である⁽¹¹⁾。本方法は、ひずみ状態におけるラマン散乱光のスペクトル変化を測定するもので、使用波長の選択により容易にマイクロメータ以下のビーム経を得ることができるため活用されている。高分子あるいはガラス系の材料中の応力測定にもレーザ光が利用できる⁽¹²⁾。材料

の複屈折現象により、材料中を透過したレーザ光の偏光状態が変化するため、入射光と透過光の偏光解析から応力状態を測定することができる。

測定対象となる材料あるいは構造に応じ、以上の応力測定技術を使い分けることで、半導体デバイス内部の詳細な応力分布測定が可能になりつつある。

以上に述べた応力測定技術と薄膜強度物性測定技術、応力シミュレーション技術の活用により、半導体デバイス内部のマイクロメータ領域の応力状態を正確に把握し、不良現象の発生メカニズムを解明することで、半導体製品においても機械的な信頼性設計技術を開発していくことが可能になりつつある。

5. おわりに

半導体デバイス製造における機械的信頼性設計技術の開発状況について簡単に紹介した。機械系の技術者にとっては、半導体という対象寸法がマイクロメータ以下ということもあり、目に見えないわからないものという印象が根強く残っていると思われる。しかし、半導体といえども構造物であり、材料力学的アプローチがふんだんに活用できる場である。半導体製品を対象とした信頼性設計技術開発は、必要に迫られていることから産業界で先行しているが、薄膜の強度物性等については、学問的にも未解決な問題が多く、理論的展開も不可欠になっており、今後は大学との連携強化がいつそう望まれるものと考えている。

文 献

- (1) 藤岡・ほか, Cz 法によるシリコン単結晶成長過程の熱履歴解析, 日本機械学会論文集, 58-554, B (1992), 3173.
- (2) 宮崎・ほか, 転位動力学モデルによるバルク単結晶育成過程の転位密度評価解析, 日本機械学会論文集, 60-573, A (1994), 1230.
- (3) 斉藤・ほか, 薄膜多層構造体応力解析プログラム SIMUS 2 D/F の開発, 日本機械学会論文集, 55-515, A (1989), 1652.
- (4) 斉藤・ほか, Si の熱酸化プロセスにおける形状・応力解析プログラム OXSIM 2 D の開発, 日本機械学会論文集, 57-541, A (1991), 2057.
- (5) 三浦・ほか, 薄膜の内部応力を考慮したトランジスタ構造の応力解析方法の検討, 日本機械学会論文集, 60-576, A (1994), 1807.

- (6) 岩崎・ほか, 粒界グルーピングの分子動力学による解析, 日本機械学会論文集, 61-586, A (1995), 1376.
- (7) 北村・ほか, 表面拡散と粒界拡散に基づく電子パッケージ内アルミ配線のストレス・マイグレーション破壊の数値シミュレーション, 日本機械学会論文集, 59-563, A (1993), 1625.
- (8) Ohta, H.・ほか, Development and Application of an Apparatus for Measuring Mechanical Properties of Thin Films at High Temperatures, *Proc. of APCFS* '93, (1993-7), 735.
- (9) 三浦, 薄膜の残留応用, トライボロジスト, 40-3 (1995), 228.
- (10) 山本・ほか, ULSI 極微小部応力評価技術の開発, 日本金属学会会報, 29-4 (1990), 256.
- (11) 三浦・ほか, 熱酸化プロセスにおけるシリコン基板残留応力の検討, 日本機械学会論文集, 58-550, A (1992), 902.
- (12) 北林・ほか, 斜入射偏光解析による微小領域の応力測定, 非破壊検査, 38-12 (1990), 1094.

(原稿受付 1995 年 8 月 1 日)

機械工学の半導体産業への寄与

1. 半導体素子 (図 1)

図 1 は, 現在量産が進められているパーソナルコンピュータ搭載用の容量 1 M (メガ) ビットのキャッシュメモリであり, 本製品内には 400 万個以上のトランジスタが作り込まれている。

トランジスタの構造解析を行う場合には, 薄膜の材質ばらつき, あるいは加工公差の累積も考慮しなければならず, 400 万個のトランジスタの 1 個が不良になっても製品は出荷できないという立場での解析が不可欠になっている。

2. トランジスタ内部の応力解析 (図 2)

トランジスタ構造の応力解析を行う場合には, 薄膜の機械的性質 (例えばヤング率, 線膨張係数, 真性応力等) が不可欠だけでなく, 化学反応解析と応力解析の連成解析技術が必要になる。この応力依存項の影響は, 薄膜の加工寸法が微細化されるにつれ相対的に大きくなってきており, 解析精度の向上には不可欠な技術になっている。

本例はドーナツ形の開口部を有したシリコン基板を熱酸化した場合の, 酸化膜形状および応力分布をワークステーションを使用して解析した結果であり, ドーナツの内周側と外周側の酸化膜形状が応力の影響を受けて変化している状況が捉えられている。

3. シリコン薄膜の結晶化反応進行過程 (図 3)

薄膜の機械的性質を決定する因子として, ミクロな結晶構造が問題になる場合が多い。これは, 結晶が特定の方位に配向しやすいため, 等方性材料とは見なせない場合が多いためである。

図 3 はアモルファスシリコン薄膜の結晶化反応を途中で停止させ透過形電子顕微鏡観察したものである。図中, 花びら状に点在しているのが結晶化した領域である。結晶化した薄膜の機械的性質には, 各結晶粒のサイズ, 結晶配向性等が大きな影響を持つため, 膜質の安定化のためには, このような結晶成長過程の制御が重要になる場合もある。

〔(株)日立製作所 機械研究所 北野 誠〕

図 1 半導体素子
〔提供 (株)日立製作所 半導体事業部〕

図 2 トランジスタ内部の応力解析
〔提供 (株)日立製作所 機械研究所〕

図 3 シリコン基板における結晶化の微視的様相 (表紙にカラー写真掲載)
〔提供 日立計測エンジニアリング(株) テクノリサーチセンタ〕