アルミニウム配線のバリア材

嶋 昇 平*

1. はじめに

高速動作する高密度 ULSI の実現には、その製造プロセスに限ってみても多くの課題が存在する。それら課題の中で配線に関するプロセスは、近年、強い関心が寄せられているものの一つである。配線プロセスの中でも本特集の目的である Al 配線材料については、ULSI 配線としての適用限界が来ているのではないかという意見が出ている。代替配線材料として Cu を用いた配線技術の研究開発が進められているという状況がそれを示している。しかしながら、Cu 配線の実用化にはまだ多くの解決すべき課題が残されている。Cu 配線の採用は、おそらく一部のデバイスに限られ、大部分のデバイスには今後も Al 配線が使われ続けていくことが予想される。そのため、Al 配線の高信頼化対策をさらに進めて、今後も使用し続けられるような高信頼性 Al 配線プロセスの研究開発が強く望まれている。

現在、Al 配線が抱えているいくつかの具体的な問題点については、すでに本誌1996年4月号の小特集「電子デバイスにおける接合技術」の中で、弊社の蓮沼、柴田らの報告が掲載されているので参考にさせていただきたい。本稿では、Al 配線において信頼性不良に対するバリアの役割を果たすいわゆるバリア材に焦点を絞って考えてみる。通常、バリアメタルというとバリアメタルレイヤーと呼ばれている Al 配線の下層または上層に設けられている高融点金属などの薄膜層が連想される。しかし、本稿ではもっと広い意味でとらえる。例えば、Cu のような Al 配線中に添加される金属もエ

レクトロマイグレーション(electromigration, EM)不良抑制に寄与しているので、信頼性不良のバリアメタルと考える。さらに後述するようなバンブー粒界と呼ばれている粒界構造も EM に対するバリア構造と考える。これまで Al 配線の信頼性上の問題点が発生する度に、種々のバリア材が提案されてきた。バリアメタルは文字どおり欠陥の発生・成長のバリアとして Al 配線の信頼性向上に大きな役割を果たしてきた。このようなバリア材開発の歴史を振り返ることで、何が問題となってどのようにそれを解決してきたか、その時のポイントは何であったかを思い起こし、今後、Al 配線の高信頼化のためにバリアメタルはどのような形で寄与すべきかを議論し、筆者なりの具体的な提言を試みる。

2. バリア材開発の歴史

現在までに発生した Al 配線の信頼性上の問題点⁽¹⁾とその対策をバリア材の観点から表1にまとめてみた。先ず、コンタクト下部の Si 基板内の p-n 接合破壊が接合深さのシャロー化で問題となった。この接合破壊は Al スパイクと呼ばれ、Si 基板中に Al がスパイク状に侵入して接合部を破壊するモードであった。原因は、Al 中における Si 固溶度が大きいことと Si の Al 中の拡散係数が大きいため、低抵抗のコンタクトを確保するための高温熱処理時に Al 中にコンタクト下部の基板 Si が固溶することに起因する不良であった。当時の Al 配線材料は、Al 中に添加金属を含まない pure-Al であった。この対策として、配線形成後に実施される最高熱処理温度を考慮して、その温度での固溶度以上に Si を予め Al 中添

* 株式会社東芝マイクロエレクトロニクス技術研究所開発主査(〒235 横浜市磯子区新杉田8)

Barrier Metals and Structures in Aluminum Interconnects; Shohei Shima (Microelectronics Engineering Laboratory, TOSHIBA Corporation, Yokohama)

Keywords: interconnection, aluminum, reliability, electromigration barrier metal, grain boundary

1997年3月17日受理

表1 Al配線における信頼性不良バリア材の例.

不良モード	目的	バリア材・構造	バリア機構
(Alスパイク)基板SiのAl中への固溶	接合破壊防止	Al中に予めSi添加	熱処理時のAl中のSi固溶度確保
高抵抗Si粒子のコンタクト部析出 高抵抗コンタクト	コンタクト抵抗の増大抑制	W, TiN, TiWバリアレイヤー	Si析出の分散化と導電層の確保
(ストレスマイグレーション)Al配線中にボイド生成して断線	Al断線防止	Al中にCu添加 TiN, TiWバリアレイヤー	導電層の確保
ヒロック成長による絶縁膜クラック, 層間短絡	ヒロック成長抑制	Al中にCu添加 Al上部にTiなどバリアメタル	メカニカルに抑制
(エレクトロマイグレーション)Al配線中にボイド生成して断線	高電流密度配線の実現	Al中にCu添加 バンパー粒界 高配向Al膜(TaAlバリア膜)	粒界部Cu凝集配線長方向の拡散経路消滅(111)配向性mp向上
コンタクト部のAlカパレージ不良	Al流動性の向上 コンタクト平坦化	表面処理TiN	バリアメタル上のAlぬれ性の改善

加することで解決を計った。Al中の添加SiがAlスパイクのバリア材としての役割を果たした。

しかし、素子サイズの微細化の進行に伴ってコンタクト径が小さくなり、Al中の添加Siが却って悪影響を及ぼすようになった。これが、Al中Siのコンタクト部への析出によるコンタクト抵抗増大不良であった。熱処理時にAl中に固溶しているSiは、室温での固溶度が当然小さいため冷却時には析出する。配線形成後に繰り返し受ける熱処理によって、この析出Siはコンタクト下部のSi基板の上にエピタキシャル成長をし、やがて微細コンタクト部全体をSiで埋め尽くすほどになる。この対策としてバリアメタルレイヤーが使われ始めた。このバリアメタルレイヤーは、本来Alスパイク接合破壊を防止する意味で開発されたが、実用上はこのコンタクト析出Siによるコンタクト抵抗増大防止を主目的として使われ始めた。このバリアメタル上では、Siが分散して析出するためにコンタクト部がSiで埋め尽くされないことが効いている。ここでは、メタルレイヤーが析出Si粒子成長のバリアとして働いている。

次いでストレスマイグレーション(Stress Migration, SM)による微細幅のAl断線不良が大きな問題となった。この問題に対してバリアメタルは、Al下部での導電層を確保する役目をすることで不良抑制に大きな役割を果たした。この時Al中にCuを添加した配線も、Cuの空孔固定作用によってSM抑制効果が認められた。このAl-Cu配線とバリアメタル層とを組合せた配線構造でSM対策がほぼ十分となった。

これまでは、Al配線層の下部に設けたバリアメタル層で配線信頼性を向上させた例であったが、Al配線層の上部に設けて信頼性を上げる例もある。ヒロック不良は、加熱時に

Al配線の内部応力が圧縮状態となって配線部に盛り上がりが生じる不良である。Al配線が被覆している絶縁膜層にクラックを発生させ配線の腐食原因になったり、多層配線構造の場合配線層間の短絡不良の原因となる。これに対しては、Al上部にバリアメタル層を設けて機械的に押さえることによって、ヒロック成長を抑制することが提案されたこともある。

最近のバリアメタル技術は、積極的にAl自体の構造を制御して信頼性を上げるという方向に向かっている。特にAl膜の(111)配向性がEM信頼性と強い相関を示すことがわかっている。この配向性をコントロールできるバリアメタルが工夫されている。バリアメタルの代表であるTiN自体もAlの配向性を向上させる効果があったが、TaAl非晶質バリアメタル⁽²⁾でさらにAl配向性を向上させた報告もなされている(前述の本誌1996年4月号)。

さらに新しい配線プロセスに対応するためのバリアメタル技術開発も要求されている。高温でのAl流動を利用した微細なコンタクト、ヴィア部へのAl埋め込み平坦化に適したバリアメタルが要求されている。高温処理時のAlと基板Si、絶縁膜との相互拡散を防止する本来の役目の他に、Al流動性を促進できるバリアメタルの表面状態特にAlのぬれ性を向上させるためのバリアメタル成膜、表面処理技術に対する要求が大きくなっている。

3. 粒界のバリア

EM不良は、Al多結晶構造における粒界拡散が不良発生の主要因である。これは、EMが問題にされた当初から現在でもその事情は全く変化していない。EM不良対策としてCuなどの金属添加が提案されており、現在までに他の多くの添加金属(Ti, Mg, Sn, Pdなど)が提案されている。これらの添加金属もEM不良発生の原因である粒界拡散を抑制するバリアという意味でバリアメタルと考えることができる。一方、粒界構造から見たバリアが存在する。バンパー粒界⁽³⁾と呼ばれている粒界構造である。これもEM抑制という目的が同一なため、ここではバリア粒界構造と考える。以下にこの添加金属のバリア性とバリア粒界構造について考えてみる。

EM不良対策としてCuが出現してから久しく、ICレベル時代の配線技術において既にEM対策の切り札として登場していた。Cu以外にTi, Mg, Sn, Pdなど多くの添加金属が提案されているが、筆者は今のところCuがやはり一番良いと考えている。CuがEMによって発生する不良抑制に大きな効果を有するのはいくつかの理由がある。EM不良発生の最大の要因は、粒界拡散であるのでそれを抑制することが大きなポイントである。

Al中にSi, Cuを添加した膜の熱処理後のAl膜中のSiとCuの濃度分布をTEM-EDX分析した結果を図1に示した。

図1 Al膜中の粒界付近のSi, Cu分布(TEM-EDX分析).

Al膜断面を粒界を横断するように分析を実施した. Cu濃度は, 粒界部に明らかなピークを示すのに対し, Siは粒界も粒内も差が無い. このCu原子が粒界中に多く存在することがEMによる粒界拡散の抑制に大きく寄与していると考えられる. 粒界部は一般に空孔が多く, いわゆるすき間の多い構造を示す. したがって, EMによる粒界拡散の経路となる. このような粒界中にCu原子が集積し空孔がCu原子によって埋め込まれ, その結果として粒界の原子密度が高くなり粒界拡散が抑制される. しかし, CuはAl中の拡散係数が大きいために粒界中に多く分布しても, 電流密度が大きくなるとCu原子自身も電子流によってEMが生じ, ついにはAlの断線不良を生じる. 一方Cuは Al_2Cu 金属間化合物を形成するので, これが粒界中に形成されて粒界拡散のバリアとしての役目をする. Al粒界中にCuが多く存在できるのは, Cu自身がAl中の拡散係数が比較的大きいためであり, 逆に考えればそのためにEMがどうしても避けられない. 理想的な添加バリアメタルとは, 熱処理で粒界に均一に凝集し易く, 一旦粒界に凝集したらそこに固定されてEMによる電子流によっても容易に拡散しない特性を持つものである.

もう一つの有効なEMバリア粒界構造は, バンブー粒界である. 図2は2種類の配線構造を持つ0.9 μm 幅のpure Al配線のEM試験の寿命分布結果である. この結果はBEM試験法によるもので, $\sim 10^{11} \text{ A/m}^2$ レベルの高電流密度下における試験結果である. ここでいう寿命は断線に至るまで要したエネルギーである. 図3はこれら2種の配線膜の粒径分布である. 寿命の長い方の配線は, 配線幅の約2.8

図2 バンブー粒界構造と3重点粒界構造のEM配線寿命分布.

図3 バンブー粒界配線と3重点粒界配線のAl結晶粒径分布.

倍の粒径を持つAl膜で, 配線中がすべてバンブー粒界で構成されている配線で一切3重点粒界を含まない配線である. 低寿命の配線は, 配線幅の約1.3倍の粒径を示すAl膜で, 配線中に粒界3重点を多く含む配線である. 寿命比較から明らかにバンブー粒界配線は, EMに対し非常に強くなっている. 寿命分布も非常にばらつきが小さく, 理想的な分布である. 一方の3重点を含む低寿命の配線は寿命分布のばらつきが非常に大きい. 高寿命を示す一部の配線は, 完全

なバンパー粒界構造をしていると考えられる。しかし、大部分の配線は、寿命が短い。ここで注目すべき点は、高寿命を示したバンパー粒界配線の断線箇所の状況であった。すべての断線部は同一で一側の配線パッド根元部であり、バンパー配線領域では全く断線していなかった。配線根元部は、Alの面積が急激に増大する部分でそこにおける粒界構造はどうしても3重点を多く含む状態となる。この粒界3重点が在る配線部でEMによりボイドが発生し断線する。この結果は、完全バンパー配線では高電流密度下でもEM不良が発生しないことを示している。また他の実験では、pure Al配線でもCu添加Al配線でも、完全バンパー配線では、ほとんど同一の寿命分布を示す興味深い結果も得られている。

しかし、実際のULSI上の配線で配線部のすべてにおいてバンパー粒界構造を持つ配線を作ることができるかどうか実用上の大きな問題点である。配線抵抗を下げる目的で配線幅を太くしたい所や多層配線構造で層間の接続部の段差部など凹凸がある所、試験パターンにあるようなパッド部の存在など、完全バンパー配線の実現に障害となっている。また、微細幅の完全バンパー構造の配線は、SM不良を発生し易いことが明らかであり、実用上は前述したようにAl配線下にバリアメタルレイヤーを設ける必要がある。一般にこのバリアメタル膜表面は微細な凹凸が多く、表面が荒れているため、その上のAl膜は加熱時における粒成長が抑制され、粒径が小さくなり易い。したがって、完全バンパー粒界構造を実現しにくい。実際に、図4に示すように、バリアメタル上のAl配線は、EM寿命がバリアメタル無しのAl配線より低寿命を示すことがある。今後もAl下層のバリアメタル層は、必須な状況と考えられるので、Alの粒成長を妨げない下層バリアメタルの開発が必要となる。すなわち、Al下

層バリアメタル層と完全バンパー構造配線が共存できるプロセス開発が必須である。

4. TiN バリアメタル開発の裏話

ここで少し話を変えてAl下層のバリアメタルレイヤーの主流であるTiNについて、開発の経緯を振り返って見ることにより、さらに信頼性の高いバリアメタル開発の指針としたい。TiNは、当初窒化物であり熱的に安定であるということで、コンタクト部のAlスパイク防止が目的で開発が始まった。初めに述べたように実際は、Si析出防止、SM抑制が契機となってプロセス開発が進められた。TiN膜はWittmer⁽⁴⁾らが精力的に開発を進めていた。筆者は後追いで開発を進めたが、当初、スパッタTiN膜はバリア性が全くなく熱処理によって、AlとSiとTiNが相互反応しAl-Ti-Siの3元金属間化合物を容易に生成してしまった。スパッタで成膜したTiNは、XRD分析によればTiNピークをはっきりと示していた。Wittmerらの報告では、TiNは十分なバリア性を示していた。スパッタ成膜したTiNは、不完全な膜ではないかと考え、スパッタTiNを拡散炉中で熱処理をしたところ823 KでもAlと基板Siの相互拡散が生じない十分なバリア性を示すTiN膜となった。この結果の解釈として、二つの説が考えられた。一つは拡散炉中でのN₂雰囲気での熱処理時に微量の酸素がTiN膜中に拡散してバリア性が強化されたスタッフバリア効果である。他の一つは、微量の未反応Tiが完全なTiNになったことでバリア性ができたとする説である。筆者は、前説を考えている。すなわち想像するにWittmerらのTiN膜は、成膜装置中の残留ガスによってすでに成膜後に酸化されていたのではないかと考えている。我々が用いたスパッタ装置は当時、到達圧力が 1×10^{-5} Paであったために、残留ガスによるTiN膜形成時の酸化が十分には生じなかったためと考えている。この教訓として、昔の文献に記された膜の物性は、現在の成膜装置で形成した膜の物性とは異なる場合があるということである。成膜技術の進歩によって、必ずしも同じ性質を示すとは限らないので、どしどしチャレンジしても良いと考えている。

ついでもう一つの裏話を。バリアメタル開発時には、特にAlとSiとバリアメタル相互間の反応が重要なヒントを与えることになる。Alヒロックの抑制とEM耐性向上を目的として、Al上に金属膜を設けるプロセスの開発をしていたときのことである。Tiは、すでに密着改善層として良く使われており、金属膜の下に設けることは普通であった。そのためAl上に成長するヒロック抑制に使えんとしてAl上にTiを設けて、熱処理を実施してみた。熱処理後にAl表面を観察した所、Al表面上に凹部の異常が見られたのでAl剝離したところ、Al下のSi基板にスパイクが非常に多く発生していた。この時のAl配線は、Siを添加したAl-Si 1%配線だったので723 Kの熱処理程度ではスパイクは発生するこ

図4 バリアメタル有無配線のEM配線寿命分布。

とはないはずであった。この原因は、後に Ti 膜部分の分析によって Ti-Al-Si 3 元金属間化合物が形成されていたことが判明した。ここで興味深い点は、Si が Al 配線下部から Ti のある Al 配線上部まで、吸い込まれるように拡散したことである。この現象は以下のようなものと考えている。まず、Ti と Al が反応し Ti-Al 金属間化合物が生成される、ここで Al 配線中に Si がすでに存在するために直ちに Ti-Al-Si 金属間化合物が生成される。Ti の膜厚が大きい場合、Al 中の Si が消費されても Si が不足となり、基板の Si が消費されるようになる。このために完全な Ti-Si-Al 化合物になるまで基板 Si が消費されて Al スパイクが生成される。Si の Al 中における拡散係数が大きいことが、この現象の大きな要因である。このように、バリア金属の開発には Al と Si とバリア金属との相互反応性を特に注意する必要がある。例えばこのような反応機構は、最近では Si で埋め込みされたコンタクト部を、Al 上部に設けた Ti 膜に吸い込ませてコンタクト部を Al で埋め込むという Si 置換埋め込みプロセスに役立っている。

5. 1 Gbit レベルの Al バリア配線のあるべき姿

ここで話を戻して、今後の高信頼性 Al 配線はどのようなべきかを考えてみる。今後ともバリア金属は、必要と考えられるが、表 1 に見られるように、当初、単に相互反応を抑制するという言葉通りのバリア金属であった。しかし、積極的にバリア金属上の Al の性質を変えようとする方向に向かっている。しかしながら、特に EM, SM に共通した問題となる Al 配線の粒界を十分に強化できているかと考えるとまだ不十分である。やはり、基本に帰って粒界拡散を完全に抑制する必要がある。

ここで、最近の EM の研究から臨界長という考え方が注目されている⁽⁵⁾。すなわち、EM 不良は、配線長に関係しており、配線長がある程度短くなると、EM による不良が発生しなくなる現象である。このメカニズムは、EM によって生じた Al 原子流は応力勾配を生じ、EM による電子流に対して逆のフローが働き Al 原子が押し戻され、不良が発生しなくなるものである。その臨界長は 10 μm から数 10 μm である。Al 結晶粒の大きさはこの臨界長より小さく、結局、粒界が完全なバリアとなっていれば、臨界長以下の配線がつながった状態となる。もし粒界のバリア性が完全であれば、EM による故障発生は生じないことになる。すなわち初心に戻って、粒界拡散バリアを完全にすればよい。

具体的な実現方法は、まだ見えていない。今後のあるべき Al 配線のすがたを図 5 に示す。配線部は完全なバンブー構造かつ、完全な粒界バリアが存在し、他の配線幅が太い 3

図 5 完全なバリアの高信頼性配線。

重点を含む粒界構造部では、粒界が完全なバリアであることが必須である。実際にどのような粒界構造が完全な粒界バリアであるかは、まだ未知であるが、例えば Cu などのような Al 粒界に選択的に濃度が高くなるように凝集するが、Cu のように EM によって移動してしまうことがないバリア材が望まれる。高温でも、高電流密度下でも拡散を生じないバリア材を開発する必要がある。

6. おわりに

Al 配線の信頼性は、成膜技術の進歩やバリア金属材の開発によって確実に向上してきた。しかし、今後は今までと同じ開発思想では信頼性の大幅な向上が期待できなくなってきた。本稿では、基本に立ち帰って粒界そのものを強化することを提案した。そのためには、EM による粒界拡散現象のさらなる基本理解や粒界構造そのものを今まで以上に解明する必要がある。この分野での基礎的解明の発展を期待するものである。

文 献

- (1) J. M. Poate, K. N. Tu and J. W. Mayer: *Thin Films-Interdiffusion and Reactions*, John Wiley & Sons, New York, (1978).
- (2) H. Toyoda, T. Kawanoue, M. Hasunuma, H. Kaneko and M. Miyauchi: Proc. 32th Ann. Int'l. Reliab. Phys. Symp., IEEE, (1994), 178.
- (3) S. Vaidja: Appl. Phys. Lett., **36**(1980), 464.
- (4) W. N. Wittmer: Appl. Phys. Lett., **37**(1980), 540.
- (5) C. K. Hu, K. P. Rodbell, T. D. Sullivan, K. Y. Lee and D. P. Bouldin: IBM J. Res. Develop., **39**(1995), 465.