LSI 銅めっき配線における埋め込み形状シミュレーション

佐野彰洋*, 小林金也*, 赤星晴夫*, 板橋武之*, 端場登志雄*, 深田晋一**, 宮崎博史***

*^(株)日立製作所 日立研究所 (〒319-1292 茨城県日立大みか町 7-2-2)

**^(株)日立製作所 デバイス開発センタ (〒198-8512 東京都青梅市新町 6-16-3)

***^(株)日立製作所 半導体グループ (〒198-8512 東京都青梅市新町 6-16-3 デバイス開発センタ内)

Filling Profile Simulations for Copper Electroplating Process

Akihiro SANO*, Kinya KOBAYASHI*, Haruo AKAHOSHI*, Takeyuki ITABASHI*, Toshio HABA*,
Shinichi FUKADA** and Hiroshi MIYAZAKI***

*Hitachi Research Laboratory, Hitachi, Ltd. (7-1-1, Omika-cho, Hitachi-shi, Ibaraki 319-1292)

**Device Development Center, Hitachi, Ltd. (6-16-3, Shinmachi, Ome-shi, Tokyo 198-8512)

***Semiconductor & Integrated Circuits Div., Hitachi, Ltd. (6-16-3, Shinmachi, Ome-shi, Tokyo 198-8512)

Key Words: LSI, Copper Electroplating, Filling Profile, Simulation, Additives

1. 緒 言

ULSI における銅めっきプロセスでは、サブミクロンスケール径のホールや溝をボイドやシームなく埋め込む必要がある。めっきにより銅を埋め込むと、通常は、銅膜が均一に成長しシームが発生する。銅膜の成長過程は硫酸銅めっき液に含まれる添加剤により変化する。適切な添加剤条件とすることで、ホールおよび溝底部からの優先的成長が生じ、ボイドおよびシーム無しで埋め込むことができる。

しかし、次世代プロセス以降、高アスペクトなホールや溝をボイドやシームのなく埋め込むことはますます困難となり、添加剤選定やプロセス最適化に多くの試行実験を要する見込みである。試行実験の回数を削減するため、添加剤の物性値からシームやボイドの有無を評価できるシミュレーション手法が望まれている。さらに、ホールおよび溝の微細化が進むと、シード層の微細な形状(微小凹凸, オーバーハング)も重要になると予測され、ボイドやシームのない埋め込みが可能なシード形状の設計も必要となる。

本研究の目的は、めっき反応抑制型添加剤の拡散消費モデルに基づき、(a)埋め込み形状シミュレーション手法の開発、(b)添加剤の物性値の適正条件を予測、(c)シード形状が埋め込みに及ぼす効果を明らかにすることである。

2. シミュレーション手法

底部からの優先的成長を説明するメカニズムに関しては数種のモデルが報告^{1)~4)}されているが未だ完全には理解されていない。めっき液には数成分の添加剤が含まれるが、Andricacos²⁾らは、めっき抑制型添加剤の消費拡散に着目することで、底部からの成長の説明に成功している(拡散消費モデル)。すなわち、添加剤はウェハ表面での消費により拡散限界にあり、ホール開口部または溝開口部で優先的に消費され、銅の析出を抑制する一方、底部には添加剤が到達せずに銅の析出が開口部に比べて高くなるため底部からの優先成長が生じる。Andricacos ら²⁾は、電界方程式

と銅イオン濃度および添加剤濃度に対する拡散方程式を結合し、埋め込み形状シミュレーションを実施した。ここで、添加剤濃度 G に対する拡散方程式 $\Delta G=0$ のウェハ表面上の境界条件として、 $G=0$ (添加剤がウェハ表面で完全に消費される)を用いた。

これに対し、本シミュレーションでは、添加剤の拡散方程式に、次の境界条件を採用した⁴⁾。

$$D\delta G/\delta n = \Theta \kappa G \quad \cdots \cdots \cdots (1)$$

$$\Theta = 1/(1+A \delta G/\delta n) \quad \cdots \cdots \cdots (2)$$

ここで、 D は添加剤の拡散係数、 κ は添加剤の消費速度係数、 n は表面に垂直方向の位置ベクトルである。式(1)は、左辺のウェハに流入する添加剤フラックスと右辺の消費速度の平衡条件を表す。 Θ はウェハ表面に対する銅膜の被覆率(添加剤で被覆されていない表面の割合)を表す。 Θ は添加剤に対するラングミュア型吸着式を仮定し、式(2)を用いた。めっき反応は銅膜上のみで起り、添加剤被覆面では阻害されるため、銅イオン電流密度は Θ に比例するとした。式(1)右辺に銅膜の被覆率 Θ が乗じてあるのも、添加剤が銅膜上のみが付着するためである。本手法では、添加剤のホールおよび溝内濃度分布が D/κ により変化するため、埋め込み特性は D/κ が重要な役割を果たす事になる。 $D/\kappa=0$ の極限では、 $G=0$ の境界条件と一致する。 D および κ が電気化学測定により求められる場合は、添加剤が埋め込みに及ぼす効果を予測できる。

3. 結果と考察

本モデルを実験との比較により検証した。表 1 に、添加剤 X ($D/\kappa=5\mu\text{m}$) および Y ($D/\kappa=100\mu\text{m}$) における形状予測計算および実験結果を示す。平均電流密度は 1.0 A/dm^2 とした。 D および κ は電気化学測定により、また式(2)の A は添加剤なしおよびありの電流-電圧曲線を比較して得られためっき電流抑制量から求めた。比較のため添加剤 X, Y の濃度および表面でのめっき抑制効果は同程度としている。表 1 から添加剤 Y では底部からの成長、X では均一成長となった。計算と実験が対応し

表1 実験との比較によるシミュレーション手法の検証

添加剤	D/κ [μm]	形状予測計算	断面SEM写真
X	100
Y	5

表2 ホール埋め込みにおける D/κ の適用範囲

D/κ [μm]	添加剤濃度分布	埋め込み形状
100
1
0.01

ている事から本手法により、ボイドの有無の D/κ 依存性を予測可能である見通しを得た。

表2に、直径 $0.2\mu\text{m}$ 、高さ $1.1\mu\text{m}$ のホール埋め込み形状の D/κ 依存性を示す。平均電流密度は $1.0\text{A}/\text{dm}^2$ とした。 $10\mu\text{m} > D/\kappa > 0.1\mu\text{m}$ では、添加剤が開口部に優先的に付着して、底部からの優先成長が起こる(表2中段)。 $D/\kappa > 10\mu\text{m}$ では、添加剤がホール底部まで均一に分布し、側壁および底部からの均一成長によりシームが発生する(表2上段)。 $D/\kappa < 0.1\mu\text{m}$ では、添加剤が開口部のみにしか分布しないため、ビア内部では添加剤なしの埋め込みとなり、シームが発生する(表2下段)。このように D/κ には適正な範囲が存在する事が判明した。 D/κ の適正な範囲は、配線のサイズ、形状により変化する。

次に、シード層形状が埋め込み形状に及ぼす影響を調べるために、微小凹凸が存在する場合(図2)、およびオーバーハングが存在する場合(図3)に対する埋め込み形状シミュレーションを実施した。表面上の微小凹凸やオーバーハングはスパッタ等によるシード層成膜時に形成される。図2から、 10nm 径の微小凹凸が存在すると、添加剤無しではボイドが発生するが、添加剤を投入するとボイドは発生しない事が判明した。また図3から、ホール肩部のオーバーハング量が増加するとボイドが発生する事が分かる。以上のように、本手法を用いて、微小凹凸およびオーバーハングの埋め込み限界サイズを予測することが可能となった。

4. 結 論

添加剤物性値を考慮して埋め込み形状を予測可能なシミュレーション手法を開発し、実験との比較により検証した。本手法により、添加剤物性値 D/κ に適正範囲が存在することを明らかとし、添加剤条件の最適化が可能となった。また、シード層の微小凹凸やオーバーハングの限界サイズが予測可能となった。

(2000-9-18 受理)

図1 シード層形状の埋め込みへの影響

文 献

- 1) M. E. Gross et al., "Proceedings of Advanced Metallization Conference in 1998", pp. 89-90, K. Takahashi and M. E. Gross, "Proceedings of Advanced Metallization Conference in 1998", pp. 91-92
- 2) P. C. Andricacos et al., IBM Journal of Research Development, Vol. 42, No. 5, September, 1998, pp. 567-573
- 3) J. Reid et al., "Solid State Technology July 2000", pp. 86-98
- 4) 佐野彰洋他：1999年秋季応用物理学会学術講演会予稿集 p. 642