

ストレスマイグレーションに起因する空孔の基本的な振る舞い

青柳 稔*

Vacancies Behavior Attributed to Stress-Induced Migration

Minoru AOYAGI

要 旨

半導体デバイスに使用される金属配線の信頼性の問題の一つに、ストレスマイグレーション現象がある。これは、試料を高温に長時間放置することにより、配線にボイドや断線を生じる現象である。本研究では、この現象のメカニズムの解明を目的として、理論的な考察をおこなった。まず、球形の金属材料の内部に球形のボイドが存在している試料を考え、このボイド表面と試料表面間における、空孔の吸収と放出について理論的な解析をおこなった。次に、熱応力下における空孔の挙動について理解するために、この金属試料に外部応力が印加された場合の空孔の振る舞いについて解析した。これらの解析の結果、ボイド表面の表面応力、試料表面の表面応力、そして、外部応力の相対関係により、ボイド表面や試料表面が空孔の吸収源や放出源になることを明らかにした。最後に、これらの解析結果をストレスマイグレーションに適し、当該現象のモデル化をおこなった。

Abstract

Stress-induced migration phenomenon is one of the problems related to the reliability of metal interconnections on semiconductor devices. The phenomenon causes voids and fractures in the interconnections during the devices leave at high temperature for a long time. The purpose of this paper is to clarify the mechanism of the phenomenon. First, on a spherical metal sample with a spherical void, vacancy absorption or emission was considered between the void surface and the sample surface. Next, vacancy behavior on the sample applied external stress was analyzed to understand the vacancy behavior under thermal stress. These results show that the surface of the void or the sample becomes a vacancy sink or a vacancy generator depending on the relative value among the sample surface stress, the void surface stress and the external stress value. Finally, the physical model was proposed to adapting these results to stress-induced migration phenomenon.

1. 研究の経緯

半導体デバイスに使用される金属配線は、下地と保護膜に囲まれた構造になっている。この構造において、配線には試料の形成プロセス時に生じた残留応力が印加されている¹⁻¹¹⁾。この残留応力は、試料を構成する各材料間の熱膨張係数の差に起因して発生し、大きさは配線内部の位置によって異なっている^{1-4, 9)}。配線内部にはこの応力に対応して、応力の無い状態とは異なった量の空孔が形成される¹²⁻¹⁵⁾。この空孔濃度の差により空孔が拡散し、そして集積する事により、配線内部にボイドが形成されたり、断線が引き起こされる^{3, 12-17)}。この現象はストレスマイグレーションと呼ばれ、半導体デバイスに使用される金属配線の信頼性の問題である。この問題は1984年に報

告され^{18, 19)}、以降、多くの研究がおこなわれているが、本現象の定量的なモデルは確立されていない。

本報告では、まず、金属試料の内部にボイドが存在している状態を考え、このボイド表面と試料表面間における空孔の吸収と放出について理論的な解析をおこなう。次に、この金属試料に外部応力が印加された場合の空孔の振る舞いについて解析する。最後に、これらの結果をストレスマイグレーションに適応して、この現象のモデルについて考察する。

2. 球形試料における空孔とボイドの挙動

2-1. 表面エネルギーと応力

図1に示す半径 b の球形の試料の内部に、半径 a の球状のボイドが形成されている場合を考える。試料は等方等質弾性体とする。試料およびボイド

* 助教授 電気電子工学科

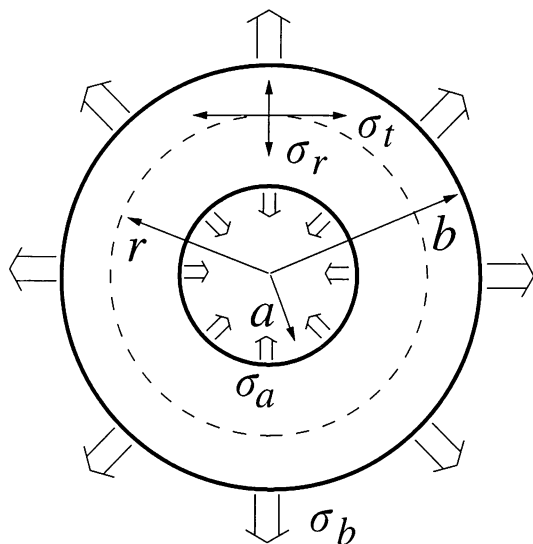


図1 内部に球形ボイドを含む球形試料の形状図

表面には表面エネルギーに起因して、次式で表わされる応力 $|\sigma_{\text{sur}}|$ が不可避免的に生じている²⁰⁾。

$$|\sigma_{\text{sur}}| = \frac{2\gamma}{r} \quad (1)$$

ここで、 γ は単位面積当たりの表面エネルギーである。式(1)において、ボイド表面の応力は r を a とし、試料表面の応力は r を b とすることで求まる。表面の曲率から、試料表面では圧縮応力、ボイド表面では引っ張り応力が印加される。

試料表面およびボイド表面に垂直に、図1に矢印で示される外力が印加された場合の、試料内部の任意の場所における、半径方向の応力 σ_r と接線方向の応力 σ_t は、表面エネルギーに起因する応力を考慮しない場合、一般的に次式で表わされる²¹⁾。

$$\sigma_r = -\frac{b^3(r^3 - a^3)}{r^3(a^3 - b^3)}\sigma_b - \frac{a^3(b^3 - r^3)}{r^3(a^3 - b^3)}\sigma_a \quad (2)$$

$$\sigma_t = -\frac{b^3(2r^3 + a^3)}{2r^3(a^3 - b^3)}\sigma_b + \frac{a^3(b^3 - r^3)}{r^3(a^3 - b^3)}\sigma_a \quad (3)$$

ここで、 σ_a はボイド表面、 σ_b は試料表面に垂直に印加される外部応力である。応力は引っ張り応力のときに正とする。

試料およびボイドの表面には、外部から応力が印加されなくとも、式(1)に示した応力が表面に垂直に印加される。これを式(2),(3)に代入することで、表面応力に起因する試料内部の応力分布が求まる。

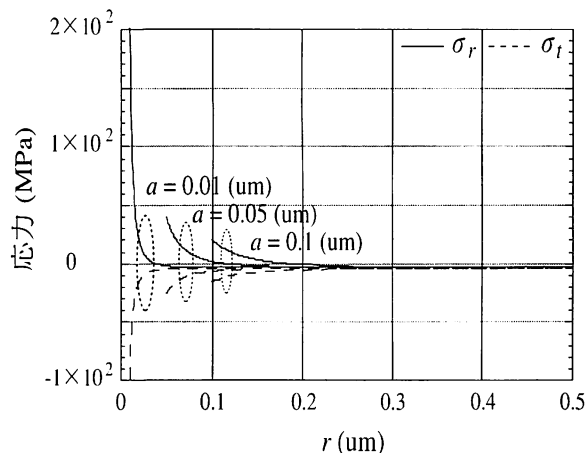


図2 試料内部の応力分布

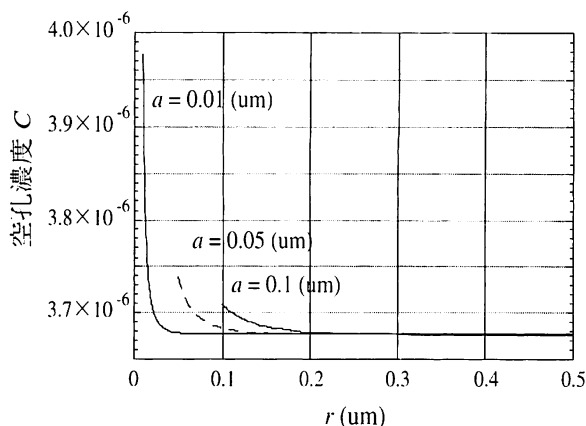


図3 試料内部の空孔濃度分布

図2にボイドの半径 a が 0.01, 0.05, 0.1 (μm) の場合における、試料内部の応力分布を示す。試料の大きさ b は 0.5 (μm) である。表面エネルギー γ は 1 (J2) とした²²⁾。

ボイドの大きさにかかわらず、ボイド表面近傍の応力 σ_r は引っ張り応力、 σ_t は圧縮応力である。ボイドが大きくなると、ボイド表面の応力は小さくなる。また、ボイド表面近傍の応力は、表面から離れるにつれて急速に減少する。つまり、ボイド表面の応力の影響範囲は非常に小さく、その応力の影響範囲はボイドの大きさ程度である。

2-2. 空孔濃度

金属試料の内部には、熱力学的に空孔が安定して存在する。金属の試料に静水圧が印加されている場合、空孔濃度は次式で表わされる^{12-15, 22)}。

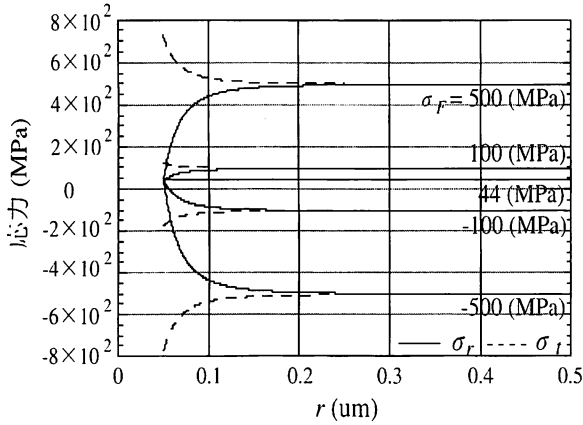


図4 外部応力が印加された場合の
試料内部の応力分布

$$C = \exp\left(-\frac{E_F}{kT}\right) \exp\left(\frac{S_F}{k}\right) \exp\left(\frac{\sigma \Omega}{kT}\right) \quad (4)$$

ここで、 E_F は空孔の形成エネルギー、 S_F は空孔の形成エントロピー、 Ω は空孔の体積、 T は絶対温度、 k はボルツマン定数である。 σ は試料内部の任意の箇所の応力であり、引っ張り応力の時に正と定義する。この式において空孔濃度 C は、金属材料の原子数 N に対する、シングル空孔数 n の比として示される。

先に示したように、試料に外力が印加されなくとも、試料およびボイドの表面には、表面エネルギーに対応して、式(1)に示される応力が発生する。この応力を、式(2)および式(3)に代入することで、試料内部の応力分布が決まる。この応力分布を式(4)に代入することで、試料内部の空孔濃度分布を求めることができる。

図2に示した応力分布に対応する空孔濃度を、図3に示す。アルミニウム配線を仮定して、空孔の形成エネルギー E_F は0.702 (eV)²³⁾、空孔の形成エントロピー S_F は $1.69k^{23)}$ とした。応力 σ は σ_r と σ_t の応力の平均値を用いた。試料の温度は300 (°C)とした。

試料表面近傍の空孔濃度は、ボイドの影響を受けない。これは、試料の大きさに比べてボイドの大きさが小さいためである。ボイド近傍の空孔濃度は、ボイドが小さいほど高い。

2-3. 表面と空孔の挙動に関する考察

図3から、ボイド近傍の空孔濃度は、他の部分に比べて高いから、ボイドは空孔を放出し、原子

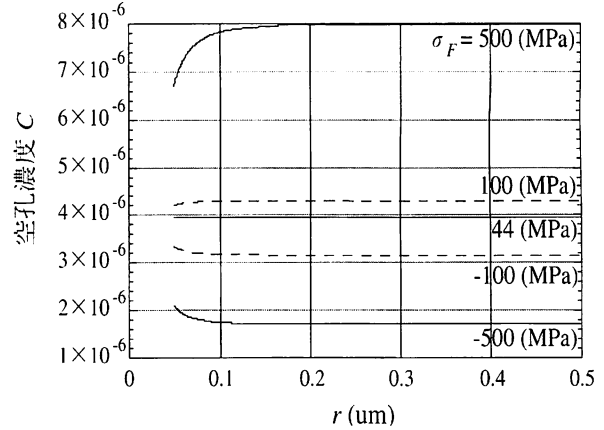


図5 外部応力が印加された場合の
試料内部の空孔濃度分布

を吸収して消滅すると考えられる。ボイドが小さいほど、ボイド周辺の空孔濃度は高いから、その消滅速度はボイドの大きさの小さいものほど早い。ボイドから放出された空孔は、試料表面に到達して消滅すると考えられる。この場合、ボイド表面は空孔の発生源として、そして、試料表面は空孔の吸収源として働く。原子と空孔は、位置を交換しながら移動するから、空孔がボイド表面から試料表面へ移動すると、原子は反対に試料表面からボイド表面へ等価的に移動する。

3. 外部応力が印加された場合に おける空孔とボイドの挙動

3-1. 応力と空孔濃度

図1に示した試料に、外部応力 σ_F が試料表面に垂直に引っ張り方向へ印加された場合、試料表面における応力 σ_b は、式(1)で示された表面エネルギーに起因する応力と、外部応力の和として次式で表わされる。

$$\sigma_b = -\frac{2\gamma}{b} + \sigma_F \quad (5)$$

図4に試料の半径 b が0.5 (μm)、そして、ボイドの半径 a が0.05 (μm)の試料において、外部応力 -500, -100, 44, 100, 500 (MPa) が印加された場合の、試料内部の応力分布を示す。外部応力の影響は、試料の内部にまでおよび、ボイドの表面エネルギーに起因する応力は、ボイドの大きさ程度まで影響をおよぼす。表面エネルギーにより試料の表面には-4 (MPa)、そしてボイド表面

には40 (MPa) の応力 σ_r が発生する。従って、外部応力44 (MPa) を試料表面に印加した場合、試料内部の応力は40 (MPa) で均一になる。

図4に示した応力に対応した空孔濃度分布を図5に示す。試料の温度は300 (°C) とした。外部応力が、引っ張り応力44 (MPa) よりも圧縮応力の場合、試料内部の空孔濃度は、ボイド近傍の空孔濃度よりも低い。外部応力が引っ張り応力44 (MPa) よりも引っ張り応力の場合には、試料内部の空孔濃度は、ボイド近傍の空孔濃度に比べて高い。

3-2. 表面と空孔の挙動に関する考察

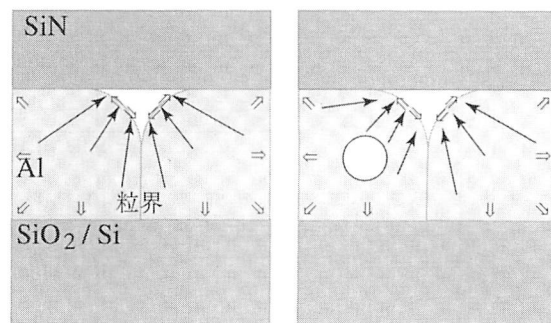
外部応力が、引っ張り応力44 (MPa) よりも圧縮応力の場合は、ボイド表面の空孔濃度は試料表面に比べて高いから、ボイドは空孔を放出し続けて、やがて、消滅する。放出された空孔は、試料表面に到達して消滅する。つまりこの場合、ボイドは空孔の放出源、試料の表面は空孔の吸収源として働く。外部応力が引っ張り応力44 (MPa) よりも引っ張り応力の場合には、試料表面の空孔濃度は、ボイド表面に比べて高いから、空孔は試料表面からボイドへ拡散する。つまりこの場合、ボイドは空孔の吸収源として、試料の表面は空孔の発生源として働く。原子は、空孔とは反対方向へ移動する。

ボイドや試料の表面が空孔の発生源になるか吸収源になるかは、外部応力と、試料表面およびボイド表面応力の相対関係により決定される。外部応力 σ_F の大きさが $|\sigma_a| + |\sigma_b|$ よりも引っ張り応力である場合には、試料表面が空孔の発生源、ボイド表面が空孔の吸収源になる。また、外部応力 σ_F の大きさが $|\sigma_a| + |\sigma_b|$ よりも圧縮応力である場合には、試料表面が空孔の吸収源、ボイド表面が空孔の発生源になる。

4. 考察

半導体デバイスに使用される配線は、下地と保護膜により周囲が囲まれた構造をしている。SiN/Al/SiO₂/Si構造の試料の製造プロセスは、まず、配線材料 (Al) が、下地 (SiO₂/Si) の上に堆積され、続いて、アニールがおこなわれる。次に、金属薄膜にパターンが形成される。最後に、保護膜 (SiN) が形成される。

この製造プロセスにおいて、下地の影響を無視すれば、アニール時に配線内部にボイドが存在する場合、配線内部の空孔分布は図3と同様に、ボイド表面の周辺で濃度が高く、配線表面の近傍で



(a) 試料内部から粒界への空孔移動 (b) ボイドから粒界への空孔移動
⇒: 応力の方向 →: 空孔移動の方向

図6 空孔の移動方向

少なくなる。この空孔の濃度差により、ボイドから空孔が放出され、ボイドは縮小あるいは消滅する。

試料はSiN成膜時に昇温されるが、配線内部には成膜温度 T_{SiN} と表面エネルギーに対応して、式(4)で示される空孔が発生する。ただし、配線の形状は球状ではないので、試料の表面エネルギーに起因する配線内部の応力分布はより複雑である。SiNが成膜された後に、配線内部にボイド、転位、および、粒界等の、空孔シンクや空孔発生源が存在しない場合、SiN成膜時に発生した空孔は、配線内部に過剰空孔として閉じ込められる。また、配線には、各材料の熱膨張係数の違いから、引っ張り応力 σ_{th} が発生する。これらの状況下における過剰空孔は次式で示される。

$$C = \exp\left(-\frac{E_F}{kT_{sin}}\right) \exp\left(\frac{S_F}{k}\right) \exp\left(\frac{\sigma_{sur}\Omega}{kT_{sin}}\right) - \exp\left(-\frac{E_F}{kT}\right) \exp\left(\frac{S_F}{k}\right) \exp\left(\frac{\sigma_{th}\Omega}{kT}\right) \quad (6)$$

ここで、 σ_{sur} はSiN成膜時の配線の表面エネルギーに起因する試料表面の応力、 σ_{th} は配線内部の熱応力である。右辺第1項はSiN成膜時の空孔濃度を、第2項は試料完成後の任意の温度 ($T \leq T_{SiN}$) における空孔濃度を示している。

SiN成膜後に、配線内部にボイド等が存在する場合、配線内部の応力分布は、§2および§3で示したように均一でなくなる。粒界を表面と考えるならば、粒界は空孔シンクや空孔発生源として働く。配線中に図6(a)に示すような粒界を考える。この場合、粒界表面の引っ張り応力は、表面部分の応力緩和のために、試料内部の応力に比べて小さい。従って、粒界表面の空孔濃度は試料内部に比べると小さく、§3で示したように粒界表面は、空孔シンクとして働く。試料内部から粒界表面へ

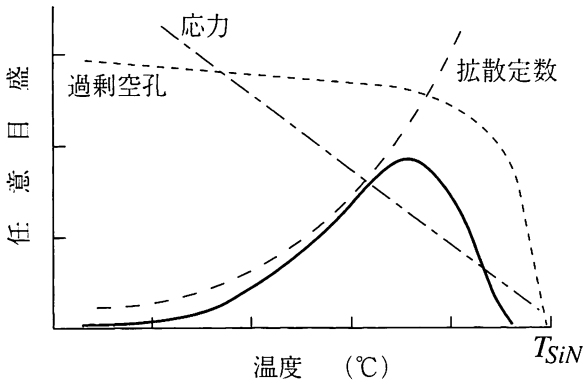


図7 空孔移動の温度特性

の空孔流量は、化学ポテンシャルの勾配によって次式で示される²⁴⁻²⁶⁾。

$$J = -\frac{D}{kT} C_v \nabla(\sigma \Omega) \quad (7)$$

ここで、 σ は熱応力や粒界の表面応力を考慮して求める。 C_v は単位体積当たりの過剰空孔数、 D は空孔の拡散定数であり、配線原子の自己拡散定数と等しい。空孔の連続の式は次式で表わされる。

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = -\frac{D}{kT} \nabla C_v \nabla(\sigma \Omega) + \frac{D}{kT} C_v \nabla^2(\sigma \Omega) \quad (8)$$

ただし、配線の内部には、過剰空孔の吸収源や発生源は存在しないと仮定している。

式(8)を解くにあたって、初期条件として式(6)に示したSiN成膜時の空孔量を考慮し、また、境界条件として粒界表面の空孔量および応力を考慮する必要がある。さらに、応力は空孔が粒界に吸収されると変化するので、応力分布を数値計算により求める必要もある。これらを連立させて時々刻々と解くことにより、空孔の移動現象を解析することができる。

SiN膜成膜後、図6(b)に示すような粒界とボイドが存在する場合、境界条件としてボイド表面の空孔量および応力を、さらに考慮する必要がある。

つまり、空孔の振る舞いを理解するには、空孔数の計算式と、応力の計算式と、空孔の連続の式を連立させて解く必要がある。そしてこれらの式を、製造条件を考慮した初期条件と、ボイド表面や試料表面等の境界条件を考慮して解く必要がある。

ここで、定性的に空孔流量の温度特性について考える。簡単のために、式(6)で示した過剰空孔が集積することで、配線にボイドや断線を生じると仮定する。過剰空孔は温度上昇に伴い減少し、

T_{SiN} において零となる。また、熱応力は T_{SiN} に近づくにつれて小さくなる。拡散定数は温度と共に大きくなる。空孔流量の温度特性は、定性的にこれらの掛け算で求められる。従って、ある温度で空孔流量は最大になり、その前後で減少する。この様子を図7に示す。この傾向は、ストレスマイグレーションに起因する配線の寿命特性と一致する^{7,17)}。

5. まとめと今後の課題

ストレスマイグレーションのメカニズムを解明するうえで重要な、空孔の基本的な挙動について考察した。その結果、ボイドの表面応力、試料の表面応力、そして、外部応力の相対関係により、ボイド表面および試料表面は、空孔吸収源にも空孔放出源にもなることを示した。また、この場合の空孔の移動現象は、空孔数の計算式と、熱応力の計算式と、空孔の連続の式を連立させて解くことで示されることを明らかにした。そして、これらの式は、製造条件を考慮した空孔濃度を初期条件とし、ボイドや試料表面の応力および空孔量を境界条件として解く必要のあることを提示した。

今後の課題は、提示したモデル式を用いて、現実的な形状の試料を対象したシミュレーションを実行し、提示したモデルの検証をおこなうことである。また、試料およびボイドの最表面における空孔の振る舞いについても検討する必要がある。

参考文献

- 1) J.T.Yue, W.P.Funsten and R.V.Taylor: Proc. 23th Annu.Int.Reliability Physics Symp.,IEEE,1985, p.126.
- 2) R.E.Jones and M.L.Basehore: Appl.Phys.Lett.**50** (1987), p.725.
- 3) S.K.Groothuis and W.H.Schroen: Proc.25th Annu. Int.Reliability Physics Symp.,IEEE,1987, p.1.
- 4) R.E.Jones: Proc.25th Annu.Int.Reliability Physics Symp.,IEEE,1987, p.9.
- 5) D.S.Gardner and P.A.Flinn: IEEE Trans. Electron Devices, **35** (1988), p.2160.
- 6) P.A.Flinn and C.Chiang: J.Appl.Phys. **67** (1990), p.2927.
- 7) A.Tezaki, T.Mineta and H.Egawa: Proc.28th Annu. Int.Reliability Physics Symp.,IEEE,1990, p.221.

- 8) T.H.Tom Wu and R.S.Rosler: Solid State Technol.
35 (1992) No.5, p.65.
- 9) K. Hiraoka: Thin Solid Films **235** (1993), p.182.
- 10) N.Matsunaga and H.Shibata: Proc.32th Annu.Int.
Reliability Physics Symp., IEEE, 1994, p.256.
- 11) Y. Kawano and T. Ohta: Proc. 33th Annu. Int.
Reliability Physics Symp., IEEE, 1995, p. 363.
- 12) M.A.Korhonen, S.Rzepka, R.G.Filippi and C.-
Y.Li: Proc.4th. Int. Conf. Stress Induced Phenomena
in Metallization, Tokyo, 1997 (American Institute of
Physics, New York, 1998), p. 303
- 13) V.Petrescu and A.J.Mouthaan: Proc. 4th. Int.
Conf. Stress Induced Phenomena in Metallization,
Tokyo,1997(American Institute of Physics.New York,
1998), p.329.
- 14) M.Aoyagi and K.Asada: Jpn.J.Appl.Phys., **37**
(1998), PL.24.
- 15) M.Aoyagi and K.Asada: Jpn. J.Appl. Phys., **38**
(1999), p.1909.
- 16) S. Mayumi, T. Umemoto, M. Shishino, H.
Nanatsue, S.Ueda and M.Inoue: Proc.25th Annu.Int.
Reliability Physics Symp., IEEE, 1987, p.15.
- 17) M.Kato, H.Niwa, H.Yagi and H.Tsuchikawa: J.
Appl. Phys. **68** (1990), p.334.
- 18) J. Klema, R. Pyle and E. Domangue: Proc. 22th
Annu.Int.Reliability Physics Symp., IEEE,1984,p.1.
- 19) J.Curry, G.Fitzgibbon, Y.Guan, R.Muollo, G.
Nelson and A.Thomas: Proc.22th Annu.Int.Reliability
Physics Symp., IEEE, 1984, p.6.
- 20) K.S.Pitzer and L.Brewer: Thermodynamics,Second
Edition (McGraw-Hill, New York, 1961), p.470.
- 21) S. P. Timoshenko and J. N. Goodier: Theory of
Elasticity , Third Edition (McGraw-Hill, New York,
1970), p.392.
- 22) P.A.Flinn, S.Lee, J.Doan, T.N.Marieb, J.C.
Bravman and M.Madden: Proc.4th.Int.Conf.Stress
Induced Phenomena in Metallization, Tokyo, 1997
(American Institute of Physics,New York,1998),p.250.
- 23) K.Furukawa, J.Takamura, N.Kuwana,R.Tahara
and M. Abe: J. Appl. Phys. Jpn. **41** (1976),p.1584.
- 24) C. Herring: J. Appl. Phys. **21** (1950), p.437.
- 25) F.G.Yost, D.E.Amos and A.D.Romig: Proc.
27th Annu.Int.Reliability Physics Symp.,IEEE,1989,
p.193.
- 26) J.J.Clement and C.V.Thompson: J. Appl.Phys.
78 (1995), p.900.

(平成13年11月22日受理)