

(論文)

高圧アニールプロセスでの銅配線熱応力評価

Annealing Process Thermal Stress Evaluation for LSI Copper Conductors



井上隆夫*
Takao Inoue



宮垣亜希*
Aki Miyagaki



大西 隆**(工博)
Dr. Takashi Onishi



吉川哲也***
Tetsuya Yoshikawa

The thermal stress in LSI copper conductor at high annealing temperatures was analyzed using two numerical simulation methods: elasto-plasticity analysis and visco-elasticity analysis. The coefficients of the constitutive equations, which we used for numerical simulation, for the copper film were decided by reverse analysis from the relationship between the temperature and the camber, measured used a copper deposited Si-wafer. The results on the study indicated that high pressure annealing was effective in preventing interior defects in copper conductors.

まえばき = LSI は集積度の向上により高速化されてきたが、デザインルールが $0.1 \mu\text{m}$ に近づくにつれて、微細化による高速化効果が低下すると言われている。

その最大の要因とされているのは配線の微細化による配線遅延の増加であり、配線遅延は配線抵抗と配線間容量の積で決まる。配線抵抗は配線幅が、配線間容量は配線ピッチが小さくなると増加することから、微細化を進めることで配線遅延が増加してきた。現在の LSI は、微細化を進めてきたことによって、これまで遅延時間の主要因であったトランジスタのゲート遅延と同等の配線遅延が生じるようになってきている。

この配線遅延の対策として、配線間容量を小さくするために層間絶縁膜を従来の SiO_2 系から、いわゆる low-k 材料に置換えるとともに、配線材料として従来用いられてきたアルミニウムに替わり、より抵抗値の低い銅を用いるプロセスの開発が進められている。

銅配線の代表的な製造プロセスであるデュアルダマシンプロセスでは、溝状に掘込んだ回路パターンに銅を電気メッキしたあとに不要な銅を除去し、溝に残った銅が配線回路となる。この製造工程には電気メッキ後のリフロ工程など、400 以上の高温での熱処理が含まれており、LSI 内部は異なる材料を複雑に組合わせた多層構造であるため、熱処理工程で銅配線に熱応力が発生する。

熱応力は、一般的に温度差と熱膨張係数差とヤング率の積に支配される。室温での銅とアルミの特性を比較すると、 Si との熱膨張係数差はアルミが 18ppm/K に対して銅が 13ppm/K であるが、ヤング率はアルミが 72GPa に対して銅が 130GPa であることから、その積はアルミよりも銅が大きくなり、銅を配線材料とすることで従来のアルミ配線よりも高い応力が発生する可能性がある。さらに、発生応力の重要な因子である降伏応力についても、銅のそれはアルミよりも高くなることも知られてい

る。

このため、銅配線技術の開発では熱応力の評価が重要となり、熱応力に起因した代表的な問題であるストレスマイグレーションなどの不都合を克服するため、材料や構造を最適化する技術開発が行われている。

当社では、熱応力に起因する不都合への対策の一つとして、熱処理中に高圧を付与するプロセス（高圧アニール処理）を開発している。高圧アニールでは、プロセス中に高圧を付与することで熱応力の履歴を制御できる可能性があり、層間の配線接続穴（Via ホール）の欠陥防止に効果が有ることも当社の実験で確認されている。

本報告では、高圧アニール装置開発の一環として、熱処理途中で Via ホール内部に発生する応力を有限要素法で計算し、高圧アニール処理による欠陥防止効果について検討した結果を報告する。

1. 銅配線応力解析方法の検討

1.1 逆解析による銅薄膜特性の推定

銅配線応力解析方法として、熱弾塑性解析、熱粘弾性解析（熱弾性クリープ解析）の 2 種類の熱応力計算手法を検討することとした。

これら 2 種類の計算方法の特徴については、各構成則の設定の項で後述するが、いずれの計算方法を用いる場合にも、材料の応力と歪みの関係を定義する構成則が各温度段階で必要となる。

熱弾塑性解析では材料の塑性歪みを応力で定義する弾塑性構成則をアニール処理温度範囲で定義することとし、熱弾性クリープ解析ではクリープ歪速度を応力と温度の関数で定義することとした。

機械部品や構造物などを対象としたこの種の解析では、同種類の材料から加工した試験片を用いることにより、弾塑性構成則については高温引張試験で求めた応力

* ㈱コベルコ科研・エンジニアリングメカニクス事業部 ** 技術開発本部・材料研究所 *** 機械カンパニー・SPE 事業化推進部

と歪みの関係，クリープ構成則についてはクリープ試験で求めた標点変位 (= 歪み) の履歴から求めている。

しかし，LSI 内部銅配線などの薄膜材料の構成則は，上記試験方法で求めた同成分の材料の構成則とは異なることが一般に知られており，別途薄膜材料特有の構成則を求める必要がある。しかしながら，従来と同様の試験方法を薄膜に適用することは困難である。

そこで，薄膜材料の評価に用いられている温度 - 応力線図が材料の構成則によって異なることに着目し，評価材料を成膜したシリコンウェーハを加熱冷却したときの温度と反りの関係から，逆解析によって構成則を求めることを試みた。

1.2 弾塑性構成則の設定

弾塑性構成則として，加工硬化係数を定数で近似した2直線近似の弾塑性構成則で検討を行った。

$$\sigma = \sigma_y + C \cdot \epsilon_{pl} \dots \dots \dots (1)$$

σ : 応力
 σ_y : 降伏応力 (弾性限)
 C : 加工硬化係数
 ϵ_{pl} : 塑性歪み

銅を厚み 0.8 μm で成膜した直径 50mm・厚さ 340 μm の [100]シリコンウェーハを，真空中で 500 まで加熱後に室温まで冷却し，昇温及び降温時の反り変形履歴を計測した。次に，(1) 式の係数 (降伏応力と加工硬化係数) を温度ごとに仮定して計算を行い，昇温時の温度 vs. 反り関係が実験結果と合致するところで係数を決定した。次に，昇温時と降温時で構成則の係数を同じ値にすると，実験結果の温度 vs. 反り関係を再現できないため，降温時の係数は各温度の昇温時のそれに定数を乗じた値で近似した。

シリコンウェーハの弾性定数は，ウェーハが十分に厚いことから単結晶の値を使用した。銅の弾性定数に文献値¹⁾を使用した計算では弾性変形による反りが実験結果より大きくなり，昇温する過程での室温直後の反り vs. 温度線図の傾きを再現計算できなかった。このため，銅薄膜の弾性定数は，各温度での文献値に定数を乗じた値を用いることとした。

反り vs. 温度関係の実験結果と計算結果を図 1 に，銅薄膜の弾塑性構成則として仮定した各温度での昇温時の応力 vs. 歪関係を図 2 に示す。

図 1 から，簡便な 2 直線近似の弾塑性構成則で実験結果を短時間でシミュレートできることが分かった。

ただし，弾塑性構成則では加熱 & 冷却速度や保持時間などの時間の効果を計算で考慮できないことから，歪速度を実験と計算で一致させることが望ましい。このため本計算では，代表的な冷却速度での実験結果を用いている。

1.3 クリープ構成則の設定

Via 直径などの寸法効果は，1.2 節で求めた弾塑性構成則で検討できるが，高圧アニール処理の保持時間と降温 & 降圧速度の影響を検討するためには，時間の効果を考慮できるクリープ構成則が適しており，IBM の Thouless らから，次のクリープ構成則を用いた銅薄膜の応力 vs. 温

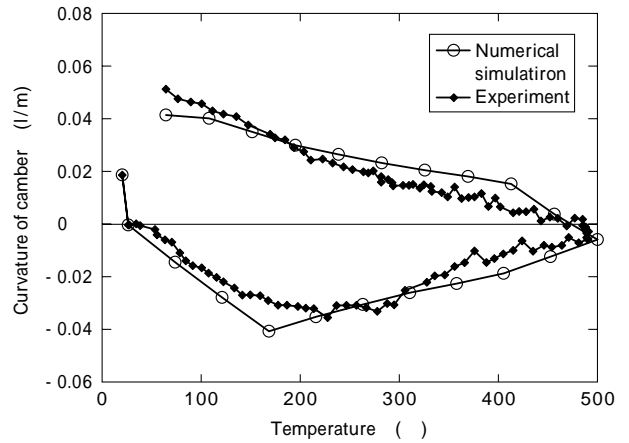


図 1 弾塑性解析による温度 - 反り線図
Fig. 1 Camber vs. temperature of elasto-plastic calculation

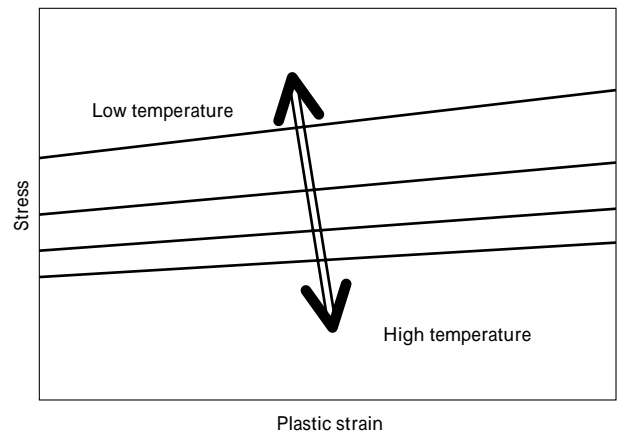


図 2 弾塑性構成則の応力 vs. 歪関係
Fig. 2 Stress vs. strain of elasto-plastic constitutive equation

度関係 (反り vs. 温度関係と等価) の計算結果²⁾ が報告されている。

$$\dot{\epsilon}_{cr-total} = (\dot{\epsilon}_2 + \dot{\epsilon}_3) + \text{greatest of } [(\dot{\epsilon}_4 + \dot{\epsilon}_5) \text{ or } \dot{\epsilon}_1] \dots \dots (2)$$

Coble creep

$$\dot{\epsilon}_1 = \left(\frac{1.282 \times 10^{-8}}{T \cdot \text{dia}} \right) \times \exp\left(\frac{-1.251 \times 10^4}{T} \right) \dots \dots (3)$$

Nabarro-Herring creep

$$\dot{\epsilon}_2 = \left(\frac{5.130 \times 10^{-5}}{T \cdot \text{dia}} \right) \times \exp\left(\frac{-2.369 \times 10^4}{T} \right) \dots \dots (4)$$

Dislocation glide

$$\dot{\epsilon}_3 = 5.774 \times 10^5 \times \exp\left[\left(\frac{-2.559 \times 10^4}{T} \right) \cdot (1 - 2.177 \times 10^{-9} \times \dots) \right] \dots (5)$$

High temperature creep

$$\dot{\epsilon}_4 = 46.19 \times \frac{\mu}{T} \times \left[\sinh\left(\frac{458.4 \times \mu}{\mu} \right) \right]^{4.8} \times \exp\left(\frac{-2.369 \times 10^4}{T} \right) \dots \dots (6)$$

Low temperature creep

$$\dot{\epsilon}_5 = 117.5 \times \frac{\mu^2}{\mu \cdot T} \times \left[\sinh\left(\frac{458.4 \times \mu}{\mu} \right) \right]^{4.8} \times \exp\left(\frac{-1.407 \times 10^4}{T} \right) \dots (7)$$

$\dot{\epsilon}_{cr-total}$: トータルクリープ歪速度

dia : 粒径 (m)

T : 温度 (K)

σ : 応力 (MPa)

μ : 係数 $\mu = 4.713 \times 10^{10} (1 - 3.557 \times 10^{-4} T)$

銅薄膜の弾性定数を弾塑性構成則と同じ値とし，

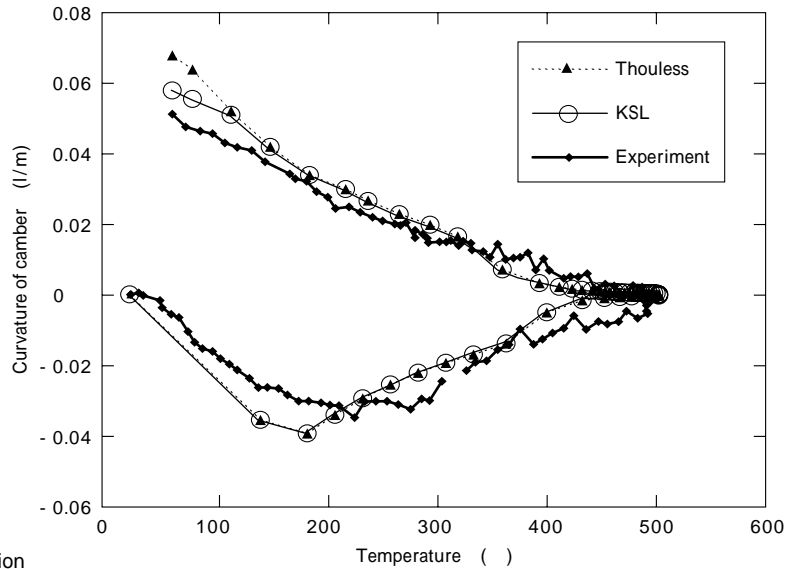


図3 弾性クリープ解析による温度 - 反り線図
Fig. 3 Camber vs. temperature of visco-elastic calculation

Thoulessらのクリープ構成則を用いて反り vs. 温度関係を計算した。計算結果を図3に示す。降温時の低温側で計算結果が実験結果より大きくなる傾向はあるが、当社の実験結果に合致した計算結果が得られた。そこで、低温かつ高応力で支配的となる(5)式(Dislocation glide)の係数を修正して当社膜のクリープ構成則とした。

2. 銅配線 Via ホールの応力解析

2.1 Via ホール径とアニール残留応力の関係

先に求めた銅薄膜の弾塑性構成則を用いて、Via ホール径がアニール処理後の残留応力に及ぼす影響を検討した。

計算モデルを図4に示す。Via 直径は $0.4\mu\text{m}$ (CASE 1)と $0.2\mu\text{m}$ (CASE 2)の2水準とし、その他のVia 深さ($1.2\mu\text{m}$)、絶縁材料(SiO_2)などの条件は同一とした。初期応力をゼロとし、室温からアニール処理温度(400°C)まで昇温後に室温まで再冷却したときの、銅薄膜の残留応力の分布を図5及び図6に、Via 中心線での応力分布を図7に示す。

冷却時のVia 内部残留応力の特徴として、図5のMises相当応力分布図から、塑性変形に影響すると考えられる

相当応力はVia ホール内部で高くなるのが分かる。また、図6の軸方向応力分布図から、Via ホール内での配線破断に影響すると考えられる軸方向応力は、Via ホール上部開口部(Mouth)の絶縁材料との境界部とVia ホール内部で高くなるのが分かる。

図7でVia 中心線での応力を比較すると、Via 径が小さいCASE 2は、軸方向応力の高い領域が広がっている。これはVia 直径を小さくするとVia 内部の断線の危険性が高まることに対応している。

2.2 高圧アニールの応力履歴

アニール後の残留応力分布を常圧アニールと高圧アニールで比較すると、高圧アニール処理も室温冷却時には常圧へ除圧されることから、室温での残留応力分布の差は小さいが、アニール途中のVia 内部断線は、室温冷却後の残留応力に加えて、冷却途中の応力履歴(応力と温度の関係)にも影響を受ける。

また、Via などの微細なローカル配線では、配線幅が1個もしくは数個の結晶で構成されることが多いため、結晶粒界での空孔発生と、結晶粒界や絶縁材料との界面などの高速な拡散経路での空孔輸送が断線に影響すると考えられている。このため、クリープ構成則の主要変数

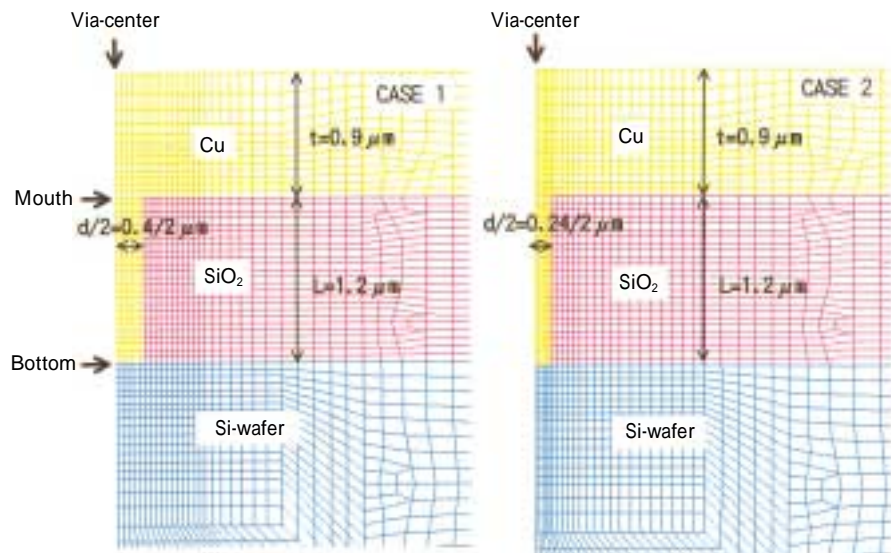


図4 Via の要素分割図
Fig. 4 FEA model for via-hole

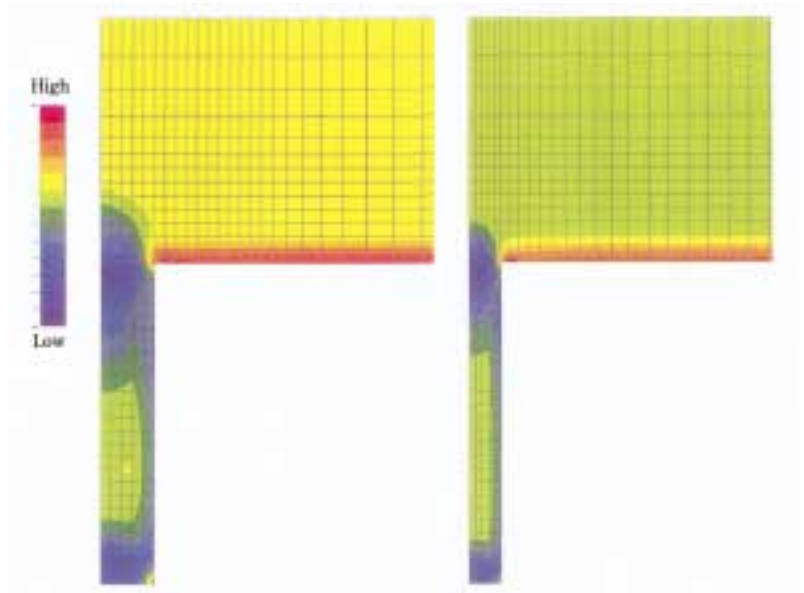


図5 Viaの残留応力分布図(Mises相当応力)
Fig. 5 Mises equivalent stress distribution after cooling

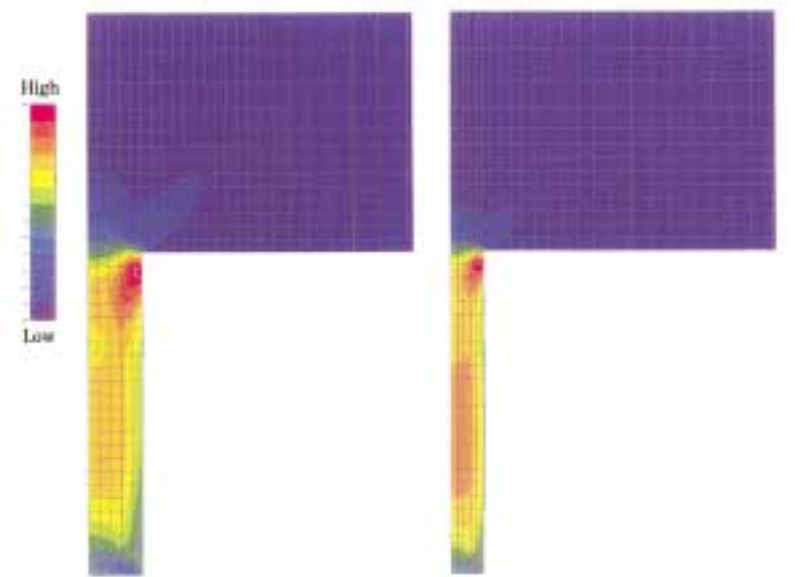


図6 Viaの残留応力分布図(軸方向応力)
Fig. 6 Axial stress distribution after cooling

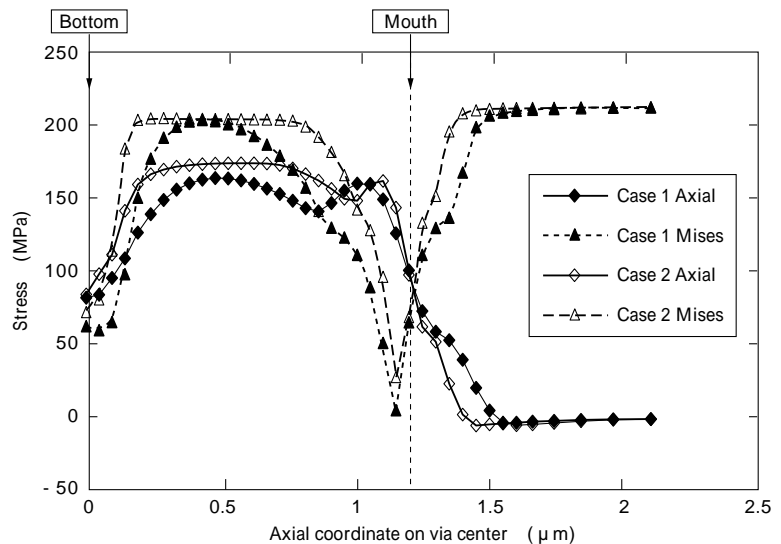


図7 Via中心軸での応力分布
Fig. 7 Stress distribution on via-hole center

である相当応力以外に、静水圧やVia軸方向応力が空孔の発生と成長に影響を及ぼす重要な因子となる。

そこで、高圧アニール処理途中の応力履歴を冷却速度や保持時間を考慮できる弾性クリープ解析を用いて検討した。図8に応力履歴を検討した運転パターンを示す。

パターン1は、温度と圧力を同期させる一般的な同時降温降压パターン、パターン2は温度と圧力を同期させず降温終了まで高圧保持する降温先行パターンとした。なお、高圧アニールの実運転除圧時には断熱膨張により冷却されることから、パターン2は仮想的な運転パター

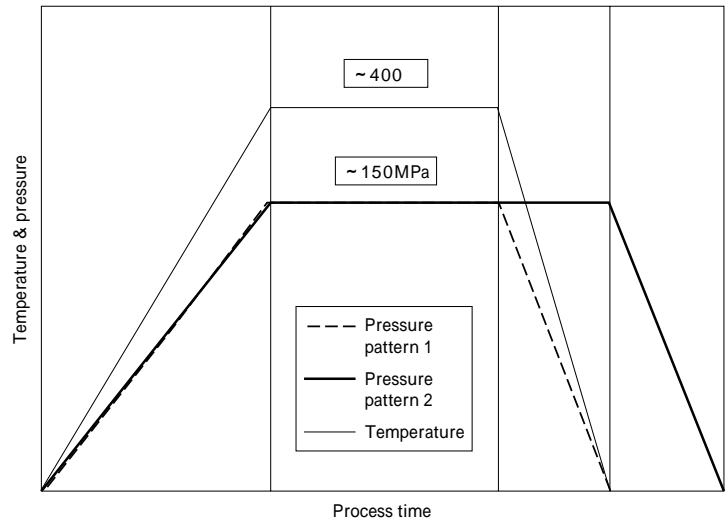


図 8 高圧アニールの運転パターン
Fig. 8 Pressure and temperature pattern

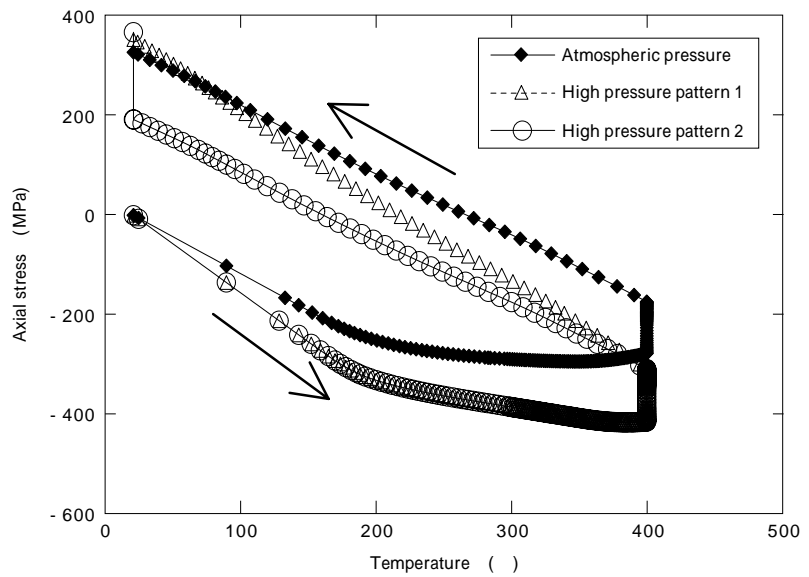


図 9 Via 中央部の軸方向応力 vs. 温度関係
Fig. 9 Axial stress vs. temperature at via-center

ンである。

図 9 に計算結果の例として Via 中央部の軸方向応力履歴を示す。図 9 から、常圧アニールでは冷却時約 270 で軸方向応力が圧縮から引張に変わるのに対して、高圧アニールではパターン 1 は 220 ，パターン 2 は 160 まで圧縮が保持されていることが分かる。つまり、高圧アニールには、アニールプロセスでの Via ホール内断線に影響すると考えられる軸方向引張応力の発生温度を、50 から 100 下げる効果があることが分かった。

むすび = 高温アニールプロセスでの銅配線内部応力を数値計算で検討し、当社で開発した高圧アニール装置が、銅配線の内部欠陥防止に効果があることが数値計算結果

から示唆された。

今後は、最適な運転条件の検討などに本技術を活用していきたい。

参考文献

- 1) 日本機械学会：技術資料「金属材料の弾性係数」, p.137.
- 2) M. D. Thouless et al. : J. Mater. Res., Vol.8, No.8 (1993), P.1845.