

**Mechanische Charakterisierung von Cu-Metallisierungen
mit unterschiedlichen Durchkontaktierungsgeometrien
und Rissbildungsprädiktion der Ta-Barriere**

Von der Fakultät für Elektrotechnik und Informatik
der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover

zur Erlangung des akademischen Grades eines
DOKTOR-INGENIEURS
Dr.-Ing.

genehmigte Dissertation
von

M.Eng. Joharsyah Ciptokusumo
geboren am 23.01.1981 in Jakarta

2012

1. Referent : Prof. Dr. sc. nat. H. Jörg Osten
 2. Referentin : PD Dr.-Ing. habil. Kirsten Weide-Zaage
 3. Referent : Prof. Dr. rer. nat. habil. Andreas Fissel
- Promotionsvorsitz : Prof. Dr.-Ing. Bernard Nacke
- Tag der Promotion : 13.07.2011

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen sowie Hilfsmittel benutzt habe. Die vorliegende Arbeit wurde noch nicht als Diplom- oder ähnliche Prüfungsarbeit verwendet.

Hannover, Januar 2012

Joharsyah Ciptokusumo

Abkürzungen, englische Begriffe und Symbole

Abkürzungen und englische Begriffe

Al	Aluminium
Anchoring	Verankerung
ANSYS®	FEM Programm
Birth and Death	Aktivierung und Deaktivierung eines Elementes in ANSYS
CTE	Coefficient of thermal expansion, thermischer Ausdehnungskoeffizient
CNT	Carbon Nano Tubes, Kohlenstoffnanoröhrchen
Cu	Kupfer
CuSi	Kupfersilizid
CoWP	Kobalt Wolfram Phosphid
Cr.	Viskoplastisch
DGL	Differentialgleichung
EModul	Elastizitätsmodul
EM	Elektromigration
El.	Elastisch
FEM	Finite Elemente Methode
GTN	Gurson-Tvergaard-Needleman-Plastizitätstheorie
Hillock	Materialansammlung
HS	Hydrostatische Spannung
IC	Integrierte Schaltkreise
Layer	Schicht
MTF	Mean time to failure, die mittlere Lebensdauer
M1	Erste Metallisierungsebene, die untere Leiterbahn
M2	Zweite Metallisierungsebene, die obere Leiterbahn
PVD	Physical vapour deposition, physikalische Gasphasenabscheidung
RP	Referenzpunkt
REM/SEM	Raster-Elektronen-Mikroskop, im Englischen: Scanning Electron Microscope
SiO ₂	Siliziumdioxid
SiCOH	Mit Kohlenstoff dotiertes siliziumoxidartiges Dielektrikum
Si	Silizium
SiCN	Silizium Carbon Nitrid
SIMS	Sekundär-Ionen-Massenspektroskopie
SM	Stressmigration
Sputter	Kathodenzerstäubung
SWEAT	Standard Wafer-level Electromigration Accelerated Test
Ta	Tantal
TaN	Tantalnitrid
TEM	Transmissions-Elektronen-Mikroskop
Th.	thermisch
Ti	Titan
TiN	Titan Nitrid
Tsub	Substrattemperatur
UCS	Ultimate Compressive Strength, Druckfestigkeit
UTS	Ultimate Tensile Strength, Zugfestigkeit
ULSI	Ultra Large Scale Integration
Via	Vertical Interconnect Access, Durchkontaktierung der Metallisierungsebenen

Voids

Löcher

Symbole

D_o	Diffusionskonstante
D	Diffusionskoeffizient
D_{Porous}	Diffusionskoeffizienten eines porösen Mediums
$\text{Div } \vec{J}_{el}$	Divergenz des Massenflusses durch Elektromigration
$\text{Div } \vec{J}_{Str}$	Divergenz des Massenflusses durch Stressmigration
$\text{Div } \vec{J}_G$	Summe der Komponenten der Massenflussdivergenz
dA	Flächenelement
α_T	Temperaturkoeffizient des spezifischen Widerstandes (TCR)
θ	thermische Ausdehnungskoeffizienten
e	Elementarladung
ε	Ausdehnung
ε_{therm}	thermisch induzierte Ausdehnung
ε_p	Porosität
E_A	Aktivierungsenergie
\vec{E}	Elektrisches Feld
E	Elastizitätsmodul
F	Lokale Änderungen der Verformung
F_{el}	Elektrostatische Kraft
F_{EM}	Resultierende treibende Kraft bei der Elektromigration
F_p	Kraft des Elektronenwindes
F_{SM}	Resultierende treibende Kraft bei der Stressmigration
f_c	multiaxiale Druckfestigkeit
f_t	multiaxiale Zugfestigkeit
$gradT$	Temperaturgradienten
$grad\sigma_H$	hydrostatische Stressgradienten
I_{ein}	Eingangstrom
J_{ein}	Eingangsstromdichte
\vec{J}	Stromdichte
\vec{J}_{el}	Massenfluss durch Elektromigration
\vec{J}_{Str}	Massenfluss durch Stressmigration
J_{Ic}	Bruchzähigkeit
J_G	generalisiertes J-Integral
[K]	Leitfähigkeits-/Steifigkeitsmatrix in der FEM
k_B	Boltzmannkonstante
κ	thermischer Leitwert
l	Länge
λ	Wärmeleitfähigkeit
N	atomare Dichte
$N(x)$	Formfunktion
ρ	spezifischer Widerstand
R	elektrischer Widerstand
Ω	atomares Volumen
$\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$	Hauptspannungen
σ_H	hydrostatische Spannung
σ_V	Von Mises Stress (VMS)

σ_M	Fließgrenze
f^*	Modifizierte spezifische Porosität
Φ	Elektrisches Potential
q_1, q_2, q_3	Tvergaard-Needleman Anpassungsparameter
T	Temperatur
T_{Anp}	Anpassungsreferenztemperatur
T_0	Anfangstemperatur
T_1, T_2	Knotentemperatur in der FEM
T_{ref}	Referenztemperatur für den stressfreien Zustand
τ	Schubspannung
τ_p	Turtuosität
ν	Poissonzahl
W	Energie
Z^*	Effektive Ladungszahl

Schlagwörter

ULSI Metallisierung, Rissbildung, Porosität in einer Ta-Barriere

Keywords

ULSI Interconnects, Cracking prediction, Porosity in Ta barrier

Abstract

Die Diversifikation der Funktionen führt bei den ULSI-Schaltungen zu der Anforderung an die steigende Anzahl der Metallisierungsebenen, längere Leitbahnen, höhere maximale Stromdichte sowie geringere Ausfallraten bei gleichzeitiger Miniaturisierung der Dimension. Die Miniaturisierung geht in den Bereich von Nanometern, bei dem die rechnergestützten Analyseverfahren eine immer wichtigere Rolle einnehmen.

In dieser Arbeit wird erstmals die Entstehung von Mikrorissen in einer Ta-Barriere am Boden von Durchkontaktierungen analysiert. Bei der Analyse kommen unterschiedliche Dimensionierungen der Durchkontaktierung in Frage. Die unterschiedliche Dimensionierung ist ebenfalls ein Resultat unterschiedlicher Herstellungsmaßnahmen. Ziel der Arbeit ist die Bestimmung der günstigsten Modelle der Durchkontaktierung in Bezug auf die mechanischen Spannungen.

Die hohen mechanischen Spannungen führen im Bereich des Durchkontaktierungsbodens zu Rissen der Diffusionsbarriere und Entstehung einer porösen Barriere. Im Hinblick auf die unterschiedlichen Modelle der Durchkontaktierung ist die Porosität erstmalig quantitativ charakterisiert worden. Im weiteren Verlauf wird ein Ansatz zur Berechnung der Cu-Diffusion durch die poröse Ta-Barriere sowie die benötigten Berechnungsparameter geklärt.

Weiterhin wird in dieser Arbeit der Einfluss von unterschiedlichen physikalischen Parametern wie z.B. unterschiedliche Dicke der Diffusionsbarriere, unterschiedliche Dicke sowie Material der Deckschicht und unterschiedliche Dielektrika analysiert, um die hohen mechanischen Spannungen zu reduzieren und die Lebensdauer der betrachteten Metallisierungsstrukturen zu erhöhen. Die Analyse gibt ebenfalls Aufschluss über den Skalierungseffekt von 45nm in den 32nm Technologieknoten und die günstigste Struktur in Bezug auf die Modelle der Durchkontaktierung.

Abstract

The diversification of functions of ULSI integrated circuits leads to the requirements of an increasing number of metallization levels, longer liner, higher maximum current density and also lower failure rate with a miniaturization of the dimensions at the same time. The miniaturization requires a dimension range of nanometers, in which computer aided analysis takes a decisive role.

In this work the appearance of micro cracking is analyzed for the first time in Ta barrier layer at the via bottom area. A different kind of via bottom design is taken into consideration. The different design models are also resulted from the different production measurements. This work aims to determine the best via bottom design model in respect of the mechanical stress distribution.

The high mechanical stress leads to cracks of the diffusion barrier in the via bottom area and to appearance of a porous barrier. In relation to the different via bottom design models the porosity is quantified for the first time. A basic approach is being introduced and its required parameters are clarified for the simulation of copper diffusion into a porous Ta barrier.

Furthermore the influence of different physical parameters like for instance the different thickness of the diffusion barrier, different materials and thickness of the cap layer, different dielectric materials is analyzed in order to reduce the high mechanical stress values and to increase the lifetime of the investigated metallization structure respectively. The analysis gives also an overview about the scaling effect from 45nm into 32nm technology node and the best metallization structure in relation to the different via bottom designs.

Inhaltsverzeichnis

Abkürzungen und Symbole	I
Schlagwörter	III
Abstract	IV-V
1 Einleitung	1
2 Stand der Technik und Lösungsansätze	4
2.1 Mikrorisse der Diffusionsbarriere und die Entstehung semi-poröser Ta-Barrieren	4
2.2 Anwendung der Bruchmechanik zur thermomechanischen Zuverlässigkeit in der Mikroelektronik	8
2.3 Lösungsansätze zur Berechnung von Rissbildung und Porosität	10
3 Beschreibung der theoretischen Ansätze	15
3.1 Unterschiedliche Degradationsmechanismen	15
3.2 Physikalischer Hintergrund	16
3.2.1 Hintergrund der Elektromigration	16
3.2.2 Hintergrund der Stressmigration	15
3.2.3 Diffusion des Cu in das intermetallische Dielektrikum	20
3.3 Theoretischer Hintergrund für die Simulation	22
3.3.1 Methode der finiten Elemente	22
3.3.2 Simulationsablauf in ANSYS®	24
3.3.3 Stressfeld in Metallisierungsstrukturen	26
3.3.4 Technik der Submodellierung	28
3.3.5 Simulationsansatz zur Berechnung der Diffusion in semi-porösen Medien	30
4 Modellbeschreibung	34
4.1 Variation der Dimensionierung der Durchkontaktierung	34
4.2 Modellierung und Geometrien	35
4.3 Geometrische Parameter der Viamodelle	36
4.4 Materialparameter	37
4.5 Randbedingungen für die Simulation	38

5 Simulationsdurchführung	40
5.1 Simulation unter Berücksichtigung des Herstellungsprozesses	40
5.1.1 Vergleich der Stressberechnung mit Referenztemperatur und EM-Bedingung	41
5.1.2 Vergleich der Stressberechnung mit Referenztemperatur und SM-Bedingung	43
5.2 Nutzbarkeit der Technik der Submodellierung	44
5.3 Mechanische Charakterisierung der 4-Via-Modelle	47
5.3.1 Stressuntersuchung mit Referenzpunkten	47
5.3.2 VMS und hydrostatischer Stress infolge EM-Randbedingung	50
5.3.3 Hydrostatischer Stress und Stressgradienten infolge SM-Randbedingung	52
5.4 Parametereinflüsse auf die Zuverlässigkeit der Metallisierungsstruktur	55
5.4.1 Einfluss der Barrierendicke	56
5.4.1.1 Einfluss unterschiedlicher Barrierendicke auf den Massenfluss durch Elektromigration	56
5.4.1.2 Einfluss unterschiedlicher Barrierendicke auf den Massenfluss durch Stressmigration	58
5.4.2 Einfluss der Deckschichtdicke	62
5.4.2.1 Einfluss unterschiedlicher Deckschichtdicke auf den Massenfluss durch Elektromigration	62
5.4.2.2 Einfluss unterschiedlicher Deckschichtdicke auf den Massenfluss durch Stressmigration	63
5.4.3 Einfluss unterschiedlicher Deckschichtmaterialien	65
5.4.3.1 Einfluss unterschiedlicher Deckschichtmaterialien auf den Massenfluss durch Elektromigration	66
5.4.3.2 Einfluss unterschiedlicher Deckschichtmaterialien auf den Massenfluss durch Stressmigration	66
5.4.4 Einfluss unterschiedlicher Dielektrika mit SM-Randbedingung	68
6 Mikrorissbildung in der Ta-Barriere	72
6.1 Schwachstellenanalyse der 4-Via-Modelle	72
6.2 Rissbildungsvorhersage in der Ta-Barriere im Submodell	75
6.3 Charakterisierung der Porosität am Durchkontaktierungsboden	78
6.4 Ausblick auf die Porositätscharakterisierung und Diffusion in poröser Ta-Barriere	80
7 Zusammenfassung und Ausblick	82
8 Literaturverzeichnis	86

1 Einleitung

Durch die Anforderung an die Vielfältigkeit der Funktionen, eine höhere Schaltgeschwindigkeit bei gleichzeitiger Kostenreduzierung steigt die maximale Anzahl der Bauelemente an, welches bei gleichen Flächen zur Miniaturisierung der Bauelemente führt. Die Dimensionierung wird herunterskaliert und die Stromdichte erhöht sich. Dabei werden Ausfälle bedingt durch Migrationseffekte wie die Elektro- und Stressmigration auffällig. Bei der Entwicklung der ULSI-Metallisierungsstrukturen wird ihre Zuverlässigkeit im Hinblick auf die Migrationseffekte und die Skalierung analysiert. In dieser Arbeit nimmt die Methode der Finiten Elemente (FEM) als ein rechnergestütztes Analyseverfahren eine entscheidende Rolle ein.

Die längeren Leiterbahnen über mehrere Metallisierungsebenen werden durch Durchkontaktierungen verbunden. Im Englischen werden sie auch als Via (Vertical Interconnect Access) bezeichnet. Resultierend aus Untersuchungen treten oftmals Zuverlässigkeitsprobleme im Bereich der Durchkontaktierung auf. Die Durchkontaktierung stellt sich als geometrischer Engpass für die Strom-, Massenflüsse und die Temperaturgradienten in der Metallisierungsstruktur dar. In dieser Arbeit beschäftigt man sich mit Metallisierungsmodellen unterschiedlicher Ausführungen der Durchkontaktierung. Die unterschiedlichen Ausführungen resultierten aus Herstellungsmaßnahmen, welche im Laufe der Arbeit mechanisch anhand Randbedingungen aus Belastungstests der Elektro- und Stressmigration charakterisiert werden. Außerdem werden unterschiedliche Parametereinflüsse bei der Skalierung der Dimensionierung der Durchkontaktierung in Bezug auf die Zuverlässigkeitsaspekte untersucht.

Ziel dieser Arbeit ist, dass Durchkontaktierungen mit der günstigsten mechanischen Spannungsverteilung bestimmt werden. Die hohen mechanischen Spannungen führen im Bereich des Durchkontaktierungsbodens zu Mikrorissen der Diffusionsbarriere und Entstehung einer semi-porösen Barriere. Lösungsansätze für die Berechnung von Rissbildung und Porosität werden aus der Literatur ausgewählt und implementiert. Hierzu werden die Stressberechnung unter Berücksichtigung des Herstellungsprozesses angewendet und die Berechnungstechnik der Submodellierung erstmalig für die Applikation der ULSI-Durchkontaktierungen verwendet. Ebenfalls erstmalig wird die Porosität im Hinblick auf die unterschiedliche Geometrien der Durchkontaktierung quantitativ charakterisiert.

Die Arbeit gliedert sich in 7 Kapitel. Es werden folgende Inhalte in jedem Kapitel behandelt:

Kapitel 2 ist der Stand der Technik und Wissenschaft + Lösungsansätze. In diesem Kapitel werden die wissenschaftlichen Beiträge in den letzten 10 Jahren zu den wichtigen Methoden der Zuverlässigkeitsbewertung, Thesen, Prozessoptimierung sowie physikalischen Erscheinungen in ULSI-Metallisierungsstrukturen oder allgemein in der Mikroelektronik diskutiert, welche in der Arbeit behandelt werden. Die Literaturstudie beinhaltet Thesen über die Mikrorisse der Diffusionsbarriere sowie Entstehung der semi-porösen Ta-Barriere. Die Anwendung der Bruchmechanik zur thermomechanischen Zuverlässigkeit in der Mikroelektronik wird vorgestellt. Der Stand der Migrationsberechnung zur Ermittlung der mittleren Lebensdauer in ULSI-Metallisierungen wird diskutiert. Die Studie bildet die Grundlage für das nächste Kapitel „Beschreibung der theoretischen Ansätze“.

Kapitel 3 stellt die Ansätze dar, welche zum Verständnis der wichtigsten physikalischen Degradationsmechanismen beitragen und die durchzuführenden Simulationskonzepte stützen. Die thermisch-elektrisch-mechanische Simulation und die Methode der Stressberechnung unter Berücksichtigung des Herstellungsprozesses werden vorgestellt. Auf die Technik der Submodellierung wird eingegangen. Darüber hinaus wird der Ansatz zur Diffusionsberechnung in semi-poröser Barriere erläutert und die wichtigen Parameter ermittelt.

Kapitel 4 beschreibt die in dieser Arbeit verwendeten Modelle der unterschiedlichen Durchkontaktierungsgeometrien. Es enthält weiterhin die geometrischen Abmessungen, die verwendeten Materialparameter sowie die Randbedingungen für die Simulation.

In Kapitel 5 wird zuerst die Stressverteilung unter Berücksichtigung des Herstellungsprozesses untersucht und anschließend mit der Stressberechnung anhand der Temperatur für den stressfreien Zustand verglichen. Die Technik der Submodellierung wurde voruntersucht, um eine genauere Stressanalyse im Bereich des Durchkontaktierungsbodens zu ermöglichen. Ferner geht es auf die mechanische Charakterisierung der 4-Via-Modelle ein. Abschließend werden die Einflüsse unterschiedlicher physikalischer Parameter auf die Zuverlässigkeit der betrachteten Metallisierungsmodelle beschrieben.

In Kapitel 6 wird die Vorhersage von Barrierenbrüchen am Durchkontaktierungsboden gezeigt, bei der die Porosität der Ta-Barriere von den unterschiedlichen Geometrien der Durchkontaktierung quantitativ charakterisiert wird.

Kapitel 7 beinhaltet eine Zusammenfassung der Arbeit mit einem Ausblick auf zukünftige Untersuchungen.

2 Stand der Technik und Lösungsansätze

In diesem Kapitel werden die in den letzten zehn Jahren erschienenen wissenschaftlichen Beiträge zur Entstehung poröser Barrieren in ULSI (Ultra Large Scale Integration) Kupfermetallisierungsstrukturen und Lösungsansätze zur Charakterisierung von Durchkontaktierungen und deren Barrieren erörtert. Diese Zusammenfassung des aktuellen Standes im Hinblick auf poröse Barrieren bildet teilweise die Grundlage für die theoretischen Betrachtungen, welche auf die folgenden Gesichtspunkte zielen:

- Mikrorisse der Diffusionsbarriere und Entstehung der semi-porösen Ta-Barriere.
- Anwendung der Bruchmechanik zur Bestimmung der thermomechanischen Zuverlässigkeit in der Mikroelektronik.
- Das Hauptspannungskriterium und der Berechnungsparameter zur mechanischen Charakterisierung von Durchkontaktierungen.

2.1 Mikrorisse der Diffusionsbarriere und Entstehung der semi-porösen Ta-Barriere

Barrieren (Liner) bestehen im Dual Damascene Prozess aus einer Kombination von Ta und TaN. Das Ta dient hierbei als Haftschiicht für das Kupfer und das TaN als Diffusionsbarriere. Die Kupfermetallisierungen werden mit einer Deckschicht abgedeckt, die als Ätzstoppschicht dient. Mögliche Deckschichtmaterialien sind SiN oder SiCN. An der Grenzschicht zum Kupfer tritt eine Erhöhung der Migration auf, deshalb werden dünne Haftvermittler als Schichten wie CuSi [61] oder CoWP [68] eingesetzt, die das Migrationsverhalten günstig beeinflussen. Die Dicke der Schichten sind im Bereich von einigen Nanometern, sodass sie in dieser Arbeit bei der Modellierung nicht mit berücksichtigt werden. Als Dielektrikum wird SiCOH/BD (Black Diamond), SiO₂, SiLK eingesetzt. Im Bereich der Durchkontaktierung treffen entsprechend vier Materialien aufeinander (Cu, Ta, TaN, SiCN). Alle Materialien haben unterschiedliche mechanische Eigenschaften, welche in Tabelle 2.1 aufgelistet sind.

Eigenschaft\Material	Cu	Ta	TaN	SiCN	Einheit
E	125	185	550	167	GPa
θ	16.7	6.6	6.5	11	ppm/K

Tab. 2.1: Mechanische Eigenschaften von Cu, Ta, TaN, SiCN.

Durch die unterschiedlichen Materialeigenschaften und Prozesstemperaturen bei dem Herstellungsprozess kommt es zu einem Vorstress durch die mechanische Verspannung innerhalb der Struktur. In der Kupfermetallisierung liegt dieser Stress bei ungefähr 250 GPa [62]. Der Vorstress kann dabei sowohl tensil (Zugspannung) als auch kompressiv (Schubspannung) sein. Bei einer tensilen Vorspannung kommt es an Orten mit hoher Verspannung zu einer unerwünschten Leerstellenbildung, die zu einem Loch an der Stelle führen kann. Beim Überschreiten der Fließgrenze wird die elastische in eine plastische Verformung übergehen und beim Überschreiten der Zugfestigkeit (im Englischen: Ultimate Tensile Strength, UTS) werden sich außerdem Risse im Material bilden. In Bild 2.1 ist ein Spannungs-Dehnungs-Diagramm dargestellt, in dem die Stelle der Fließgrenze und der Zugfestigkeit eingezeichnet ist.

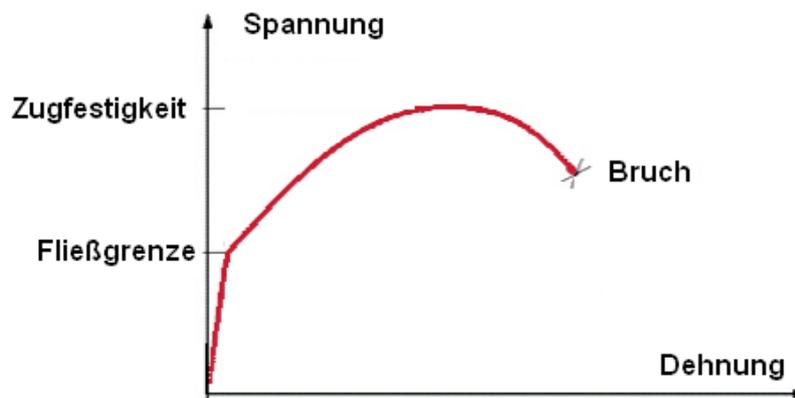


Bild 2.1: Spannungs-Dehnungs-Diagramm.

Die Barrierendicken werden wie alle anderen Abmessungen bei einem Wechsel des Technologieknotens skaliert. In der Tabelle 2.2 ist die Skalierung aufgelistet.

Technologieknoten	Ø Durchkontaktierung	Barrierendicke	Einheit
90	150	20	nm
65	100	20	nm
45	70	14	nm
32	50	12	nm

Tab. 2.2: Skalierung beim Wechsel des Technologieknoten [10, 62, 64].

In der Literatur sind die Barrierendicken im Bereich des 90 und 65 nm Technologieknoten zu 20 nm angegeben [64]. Die geometrischen Dimensionierungen der Viamodelle wurden zunächst in dem 65nm Technologieknoten nach Literaturangaben modelliert. Mit einem Skalierungsfaktor von 30% werden die geometrischen Parameter in die 45- sowie 32nm Technologieknoten herunterskaliert [21]. Bei der Modellierung entspricht die Leiterbahnbreite

der unteren Metallisierung jeweils einmal, zweimal und dreimal dem Durchmesser der Durchkontaktierung. In der Modellbezeichnung steht also beispielsweise das 65nm-Einsinkmodell für ein Einsinkmodell in 65nm Technologieknoten mit einer Leiterbahnbreite der unteren Metallisierung, welche dreimal dem Durchmesser der Durchkontaktierung entspricht. Abgesehen von dieser Anmerkung entspricht die Leiterbahnbreite aller Submodelle einmal dem Durchmesser der Durchkontaktierung.

Eine Variation der Schichtdicken der Barriere und Deckschicht sowie des Deckschichtmaterials kann Einflüsse auf das mechanische Verhalten zeigen und wird im Verlauf dieser Arbeit untersucht.

Mikrorisse der Diffusionsbarriere durch höheren Stress am Viaboden

Durch das Aufeinandertreffen unterschiedlicher Materialien entsteht allgemein im Bereich des Durchkontaktierungsbodens ein hoher Stress. Durch eine verankerte Geometrie der Durchkontaktierung führt es in diesem Bereich zusätzlich zu einer erhöhten Schubbelastung insbesondere für die Diffusionsbarriere. Da die Diffusionsbarriere das höchste E-Modul in der Metallisierungsstruktur besitzt, tritt der höchste Stress meistens in der Ta-Barriere insbesondere am Durchkontaktierungsboden auf. Das Bild 2.2 zeigt eine Transmissionselektronenmikroskopie (TEM)-Aufnahme einer Metallisierungsstruktur des 65nm Technologieknoten nach einem EM-Test mit einer Substrattemperatur von 325°C und einer Eingangsstromdichte von 1.5 MA/cm² [7].

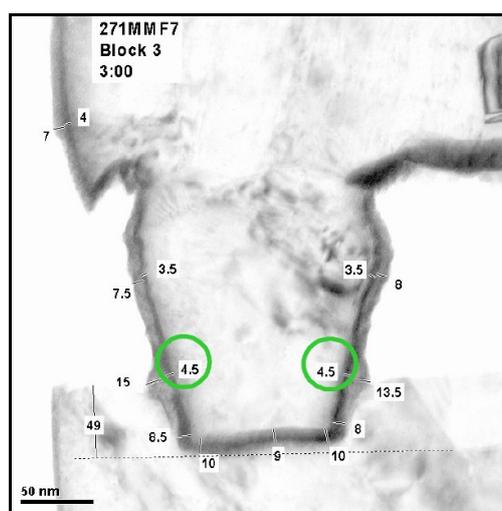


Bild 2.2: Deformierte Ta-Barriere nach einem EM-Test bei einer Barrierendickenuntersuchung [7].

An den grün markierten Stellen der Barriere ergeben sich Materialverluste, welche durch die elastisch-plastische Deformation der Ta-Barriere verursacht wurde. Es resultiert eine semi-

poröse Barriere, sodass die Kupferdiffusion in diesem Bereich nicht mehr verhindert werden kann [7]. Weiterhin wurde in [10] berichtet, dass sich Ta/TaN-Materialverluste auch nach dem Herstellungsprozess der Durchkontaktierung bilden können. In Bild 2.3 ist diese Erscheinung bei einer Metallisierungsstruktur aus dem 180nm Technologie-Knoten dargestellt.

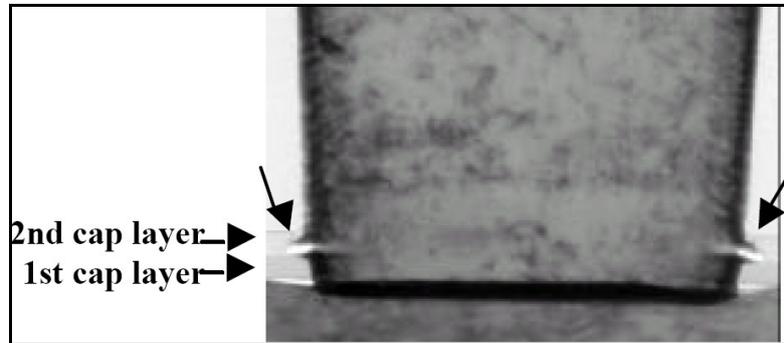


Bild 2.3: Ausgerissene Ta-Barriere bei der Herstellung der Durchkontaktierung 180nm-Technologie [10].

Die in Bild 2.3 dargestellte Metallisierungsstruktur besteht aus der Cu-Metallisierung, einer Ta/TaN-Diffusionsbarriere, SiN als erste Deckschicht und SiO₂ als zweite Deckschicht und als Dielektrikum. Die Deformation führt zu dem möglichen Hinweis auf eine völlig ausgerissene Ta-Barriere. Da diese Erscheinung unmittelbar nach der Herstellung der Durchkontaktierung vorgefunden wurde, ist der Vorstress während des Herstellungsprozesses eine mögliche Ursache des Wachstums sowie der Ansammlung von Leerstellen und damit Löchern im Material. Die Ansammlung und das Wachstum der Leerstellen werden hauptsächlich von den Gradienten der mechanischen Spannungen gesteuert.

Fazit ist, dass es bei der Herstellung dünner Barrierenschichten zu einer Entstehung von Mikrorissen der Ta-Barriere speziell am Boden der Durchkontaktierung kommen kann. Die Risse werden durch den hohen Stress hervorgerufen und durch die erhöhte Schubbelastung im Bereich der verankerten Durchkontaktierung verstärkt. In dieser Arbeit wird der Vorstress als ein Ansatz zur Berechnung der Entstehung poröser Ta-Barrieren am Boden der Durchkontaktierung genommen. Durch die entstehenden offenen Mikrorisse kann Kupfer an bestimmten Stellen der Durchkontaktierung durch die Barriere diffundieren und sich dann in der Nähe der Deckschicht anlagern.

Porosität durch Bildung von Nanosäulen bei der Abscheidung polykristalliner Dünnschichten

Für die Verwendung als Diffusionsbarriere in ULSI-Metallisierungsstrukturen eignen sich hitzebeständige und spröde polykristalline Materialien wie z.B. Ti, TiN, Ta und TaN in denen Kupfer eine allgemein höhere Aktivierungsenergie für die Diffusion durch diese Materialien

besitzt [4, 12]. Die polykristallinen Dünnschichten werden bei der Herstellung von ULSI-Metallisierungen schichtweise abgeschieden. Die Abscheidung dieser polykristallinen Materialien führt zur Bildung von Nanosäulen an den Korngrenzen. Die Entstehung dieser Nanosäulen wurde anhand einer drei-dimensionalen Monte Carlo Simulation gezeigt, bei der das Kristallwachstum polykristalliner Dünnschichten auf einem Substrat gezeigt wird [12].

Wegen der zurzeit noch fehlenden Kenntnis der Aktivierungsenergie und der Diffusionskonstanten der polykristallinen Materialien wurde als Hilfsparameter für die Simulation ein willkürlicher Diffusionskoeffizient D^* angenommen, der im Laufe der Simulation zunehmend eingesetzt wurde. Es wurde die Abscheidung von 50 Monoschichten in den Simulationen berechnet. In Bild 2.4 werden die Simulationen bei der Abscheidung mit größer werdenden Diffusionskoeffizienten dargestellt.

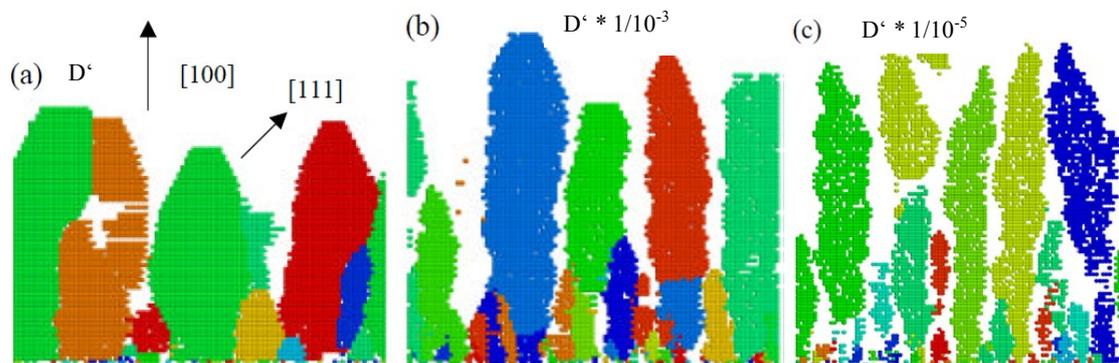


Bild 2.4: 3D Monte Carlo Simulation einer Abscheidung von polykristallinem Material mit zunehmendem Diffusionskoeffizienten [12].

Aus Bild 2.4(a) ist ersichtlich, dass die Abscheidung dünner polykristalliner Schichten schon bei einem relativ niedrigen Diffusionskoeffizienten zur Bildung von Leerstellen an den Korngrenzen führt. In Bild 2.4(b+c) ist deutlich zu sehen, dass dieser Effekt verstärkt ist. Die Abscheidung bei größeren Diffusionskoeffizienten kann zur Bildung von Löchern, zu einer geringeren Materialdichte sowie zur Bildung von Säulen an den Korngrenzen führen. Diese Säulen öffnen somit unerwünschte Kanäle für die Diffusion durch diese poröse Barrierenschicht, welches die Aussage der Entstehung poröser Barriere verstärkt.

2.2 Anwendung der Bruchmechanik zur thermomechanischen Zuverlässigkeit in der Mikroelektronik

Alle Materialien sind in der Regel diskontinuierlich. Wenn man diesen Materialien eine Form durch einen beliebigen Herstellungsprozess gibt, würden Diskontinuitäten in Form von

Leerstellen im Gefüge durch die ungünstige Verteilung der Körner entstehen und wachsen. Die Bruchmechanik wird bei der Zuverlässigkeitsbewertung mikroelektronischer Systeme derart herangezogen, dass das System nach der Initiierung eines Risses als ausgefallen erklärt wird [1]. Die Rissinitiierung setzt genau dann ein, wenn die Belastung im Rissspitzenbereich eine kritische materialspezifische freigesetzte Energie J_{Ic} (die Bruchzähigkeit) erreicht [59].

Zu der gesamten freigesetzten Energie im Falle einer Rissausbreitung (vom Anfangs- bis zum Endzustand der Rissausbreitung) tragen ein thermischer, (visko)inelastischer und ein elastischer Belastungsprozess bei. In Bild 2.5 ist die Aufteilung dieser Belastungen von einem rissbehafteten Prüfkörper bildlich dargestellt.

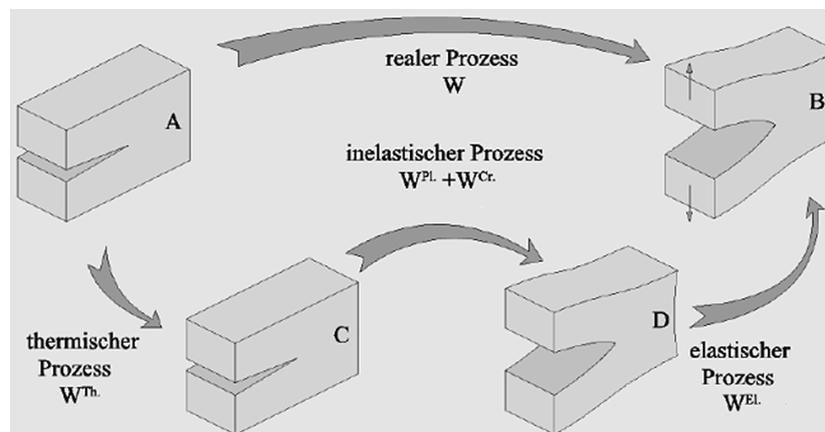


Bild 2.5: Belastung eines rissbehafteten Prüfkörpers aus inelastischem Material [1].

Die im Bild 2.5 beschriebene Abkürzung W steht für Energie. Der Index Th. steht für thermisch, Cr. für viskoplastisch, Pl. für plastisch und El. für elastisch.

Der entscheidende generalisierte Aspekt bei der Ermittlung der gesamten freigesetzten Energie ist der, dass nur die elastische Energie (der Prozess D zu B im Bild 2.5) den Riss mechanisch belastet und infolge einer Rissausbreitung frei werden kann. Die inelastischen Energien (der Prozess C zu D im Bild 2.5) ändern zwar die Mikrostruktur des Materials nahe der Rissspitze, können aber den Riss selbst nicht mehr belasten. Der Zustand D ist dann der Ausgangszustand der Berechnung. Somit wird für die Lebensdauerabschätzung ausschließlich der elastische Anteil des Belastungsprozesses und linear elastische Materialparameter berücksichtigt [1, 59]. Dieses Konzept wird in dieser Arbeit für die Durchführung der Berechnung implementiert.

2.3 Lösungsansätze zur Berechnung von Rissbildung und Porosität

Hauptspannungen als Ursache der Delamination an Korngrenzen und Grenzschichten

Die Ursache des Lochwachstums sind bei den beschleunigten EM-Belastungstests weder die atomaren Massenflussdivergenzen noch die Gradienten der mechanischen Spannungen und die Temperaturgradienten, sondern die Hauptspannungen (σ_1 , σ_2 , σ_3) [13]. Diese Hauptspannungen führen insbesondere an den Korngrenzen durch die ungünstige Verteilung der Kornstruktur beim Überschreiten bestimmter Dehnungsenergien für die Adhäsion zur Delamination. Die Degradation wird bei diesem Ansatz allein auf die Delamination infolge der Hauptspannungen zurückgeführt. Die äußere physikalische Erscheinung einer Delamination unterscheidet sich nicht von einer Rissausbreitung. Aus dieser Überlegung ergeben sich in dieser Arbeit die Hauptspannungen als einen Lösungsansatz zur Berechnung der Mikrorissbildung.

Das Hauptspannungskriterium zur Rissbildung

Die bruchmechanischen Aspekte gewinnen auch in der Mikroelektronik immer mehr an Bedeutung, da die ULSI-Strukturen tatsächlich hohe Stresswerte aufweisen. Im Bereich des Bauingenieurwesens haben Willam-Warke 1975 einen Ansatz zur Untersuchung von mehraxialem Belastungsverhalten makroskopischer Bauteile entwickelt [24]. Der Ansatz basiert auf dem so genannten ersten Hauptspannungskriterium in der Bruchmechanik zur Beschreibung der Rissbildung [58], welche sich wie folgt formuliert:

$$\text{Max}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \geq \text{UTS} \quad (1)$$

Die Gleichung (1) sagt folgendes aus : Wenn eine der Hauptspannungen (σ_1 , σ_2 , σ_3) größer oder gleich der Zugfestigkeit eines Materials (UTS) ist, dann beginnt das Material seine Tragfähigkeit zu verlieren. Dieses kann den Stress dann nicht mehr durch plastische Deformation aufnehmen sondern es müssen erste Risse entstehen. Anhand dieses Ansatzes kann man schnell die Rissbildungsstellen in der Struktur vorhersagen. Diese Vorhersage fand in [51] schon ihre Anwendung in der Nanoelektronik zur Rissbildungsprädiktion. In dieser Untersuchung wurden die Rissbildungseigenschaften von Kohlenstoffnanoröhrchen (im Englischen: Carbon Nano Tubes) verschiedener Abmessungen in Bezug auf unterschiedliche umgebende Zementwerkstoffe charakterisiert. Die Rissbildungsstelle sowie die Quantität der Risse insbesondere an dem Grenzbereich zwischen der Oberfläche der Kohlenstoffnanoröhrchen und den umgebenden Werkstoffen wurden festgestellt. Dieser

Ansatz wird in dieser Arbeit erstmals in Bezug auf die Rissbildung in der Diffusionsbarriere implementiert.

Es gibt drei Rissarten, die nicht nur auf den Werten der Hauptspannungen sondern auch auf Schubspannung basieren. Alle Rissarten sind an dem Rissbildungsprozess beteiligt. Die Theorie nach Willam und Warnke behandelt die Rissbildung und das –wachstum auf unterschiedlicher Art und Weise. In Bild 2.6 sind die drei Rissarten dargestellt.

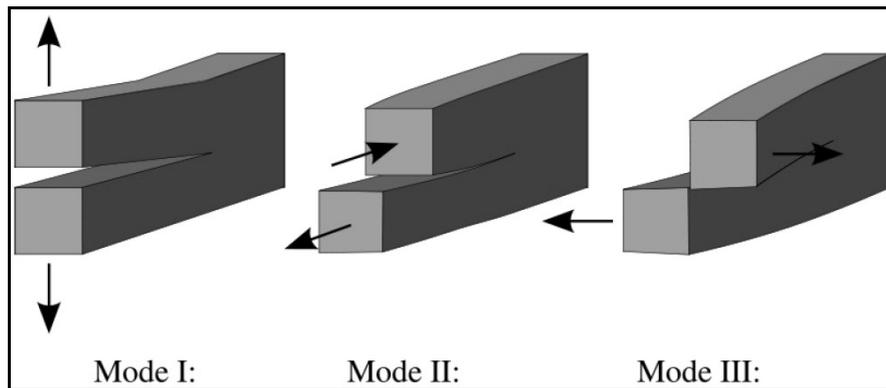


Bild 2.6: unterschiedliche Rissarten in der Bruchmechanik [30].

In der Mode I entsteht ein Riss durch Hauptspannungen. In der Mode II wird der Riss durch Schubspannungen hervorgerufen und bei der Mode III handelt sich um Risse durch Scherspannungen. Das Hauptspannungskriterium beschreibt die Rissart in der Mode I, welche theoretisch nur aufgrund der Volumenänderung durch die Hauptspannungen (σ_1 , σ_2 , σ_3) bzw. den hydrostatischen Stress zu Stande kommt. Es gibt insgesamt vier Stresszustände, in denen unterschiedliche Riss- bzw. Wachstumskriterien hergeleitet werden. Diese Stresszustände sind nach [24] wie folgt beschrieben:

$$1. \quad 0 \geq \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3 \text{ (kompressiv-kompressiv-kompressiv)} \quad (2)$$

$$2. \quad \sigma_1 \geq 0 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3 \text{ (tensil-kompressiv-kompressiv)} \quad (3)$$

$$3. \quad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq 0 \geq \sigma_3 \text{ (tensil-tensil-kompressiv)} \quad (4)$$

$$4. \quad \sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3 \geq 0 \text{ (tensil-tensil-tensil)} \quad (5)$$

Bevor die Risswachstumskriterien hergeleitet werden, muss der Stresszustand der betrachteten Struktur eindeutig sein. Das allgemeine multiaxiale Risswachstumskriterium kann nach [24] in der folgenden Form ausgedrückt werden:

$$\frac{F}{f_c} - S \geq 0 \quad (6); \text{ mit:}$$

F : Funktion von (σ_1 , σ_2 , σ_3)

S : Funktion von $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, f_t, f_c, f_{cb}, f_1$ und $f_2)$

f_c : Druckfestigkeit (im Englischen: Ultimate Compressive Strength, UCS)

Hierbei ist f_t die multiaxiale Zugfestigkeit (UTS), f_c ist die multiaxiale Druckfestigkeit (UCS), f_{cb} ist die biaxiale Druckfestigkeit, f_1 ist die biaxiale Druckfestigkeit bei einem bestimmten hydrostatischen Stress und f_2 ist die multiaxiale Druckfestigkeit bei einem bestimmten hydrostatischen Stress. In dem Stresszustand (5), in dem sich die Metallisierungsstrukturen meistens befinden, lauten $F = \sigma_{(1,2,3)}$ und $S = UTS/UCS$. Daraus folgt das Kriterium der Hauptspannung aus (6):

$$\frac{\sigma_{(1,2,3)} - UTS}{UCS} \geq 0 \quad (7)$$

Erfüllt eine der Hauptspannungskomponente das Hauptspannungskriterium (7), so tritt eine Rissbildung auf der planaren Ebene des verantwortlichen Hauptstresses auf. Erfüllen alle Komponenten der Hauptspannung das Kriterium, so tritt der vollständige Bruch des Materials auf.

Ermittlung des UTS des Tantal in der Nanodimension

Die Prognose der Rissbildungserscheinung nach Willam-Warnke bedarf der Kenntnis des UTS des Tantal in der Nanodimension. Um den UTS von Tantal zu bestimmen wurden Zugversuche im Bereich von Nanometern in [3] durchgeführt. Hierzu wurden Zugstäbe aus reinem Tantal mit einem Durchmesser von 1013 bis zu 294 nm gefertigt. Dieser Zugversuch wurde durchgeführt, um den mechanischen „Size“-Effekt der mechanischen Materialparameter bei einer enormen Verkleinerung festzustellen. Das Bild 2.7 stellt beispielhaft die Zugstäbe mit einem Durchmesser von 700 nm nach einem Druck- und Zugversuch dar.

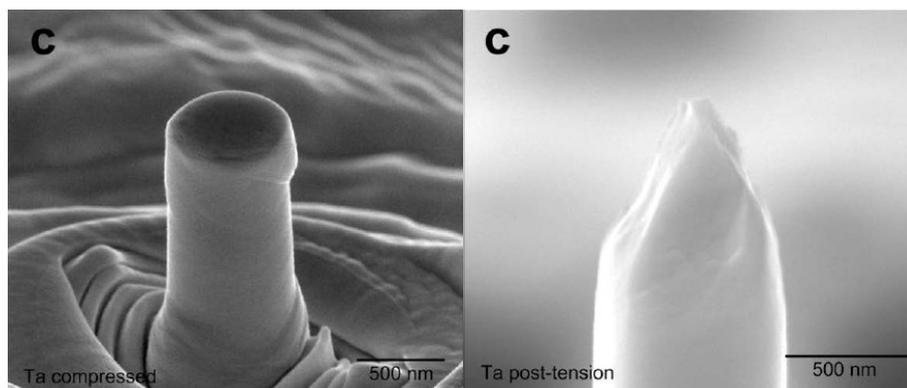


Bild 2.7: SEM Bild von Zugstäben aus Tantal nach einem Druck- und Zugversuch [3].

Diese Zugproben werden mit konstanter Kraft oberhalb der Streckgrenze gedrückt und gezogen. Kontinuierlich werden der Querschnitt und die Länge der Proben gemessen und daraus die tatsächliche Spannung und die tatsächliche Dehnung berechnet. Die Spannungen und Dehnungen werden für die jeweiligen Zugproben in einem Diagramm aufgezeichnet. Das Bild 2.8 zeigt das Spannungs-Dehnungs-Diagramm nach dem Druck- und Zugversuch.

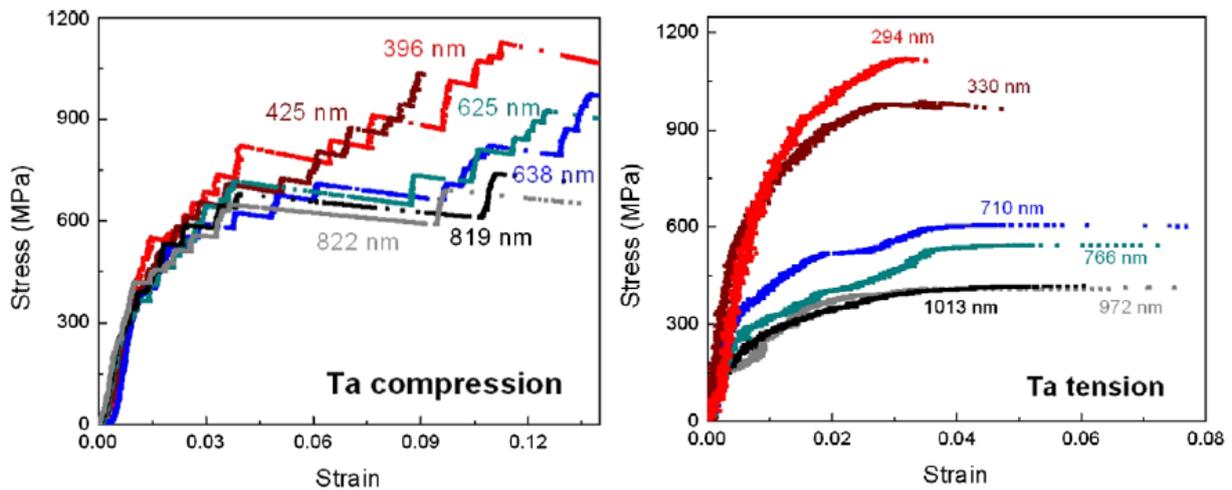


Bild 2.8: Spannungs-Dehnungs-Diagramm von Tantal im Bereich von Nanometern [3].

Aus dem Bild 2.8 geht hervor, dass der zu erwartende mechanische „Size“-Effekt sowohl bei dem Druck- als auch Zugversuch deutlich auftritt. Bei dem Druckversuch fällt auf, dass die Messung der kontinuierlichen Querschnittsab- und zunahme mit sehr vielen Messunsicherheiten behaftet ist. Der Wert des UCS des Tantals kann man dadurch nur schwer ablesen.

Bei dem Zugversuch hingegen ergibt sich eine deutlichere Aufzeichnung des Spannungs-Dehnungs-Diagramms, sodass der UTS leicht ablesbar ist. Bei beiden Versuchen kann man feststellen, dass der mechanische Size-Effekt im Mikrometerbereich aufhört. Dies ist bei dem Druckversuch ab 819 nm und bei dem Zugversuch ab 972 nm der Fall. Bei dem Zugversuch ab 972 nm Durchmesser würde sich ein UTS des Tantals von ca. 450 MPa ergeben und dies würde mit dem UTS-Wert des Tantals auf der mikroskopischen Ebene übereinstimmen [23].

Das Gurson-Tvergaard-Needleman-Modell

Einen weiteren Ansatz zur Simulation des Risswachstums stellt die Gurson-Tvergaard-Needleman-Plastizitätstheorie (GTN) dar. Das GTN-Modell ist ein schädigungsmechanisches Modell, welches aus der Kontinuumsmechanik stammt. In der Realität sind Materialien grundsätzlich diskontinuierlich. Eine Art der Diskontinuität stellt dabei auch die Porosität dar.

Diese Theorie basiert darauf, dass das reale diskontinuierliche Material durch ein vollständiges kontinuierliches Modell ersetzt wird. Sie setzt jedoch die Erkenntnis voraus, dass das zu betrachtende Material als elastisch-plastisches Material mit einem porösen Anteil aufgefasst werden kann. Das GTN-Modell berücksichtigt die Porosität in dem Risswachstumsprozess im plastischen Bereich bzw. beim Fließen und betrachtet sie als ein Hohlraumvolumen des zu untersuchenden Materials, welches sich aufgrund der Materialplastizität und der multiaxialen Stressbelastung bildet und wachsen kann. Im Falle von porösen Barrieren handelt es sich dabei um Mikrohohlräume. Folgende Mechanismen sind für die Hohlraumentwicklung verantwortlich [36, 37, 38]:

- Hohlraumentstehung
- Hohlraumwachstum
- Hohlraumvereinigung

Die modifizierte elastisch plastische Fließbedingung nach Tvergaard-Needleman lautet wie folgt:

$$F = \frac{\sigma_V^2}{\sigma_M^2} + 2q_1 f^* \cosh \frac{3q_2 \sigma_H}{2\sigma_M} - (1 + q_3 f^{*2}) = 0 \quad (8); \text{ mit:}$$

σ_V : Von Mises Stress

σ_H : hydrostatischer Stress

σ_M : Fließgrenze

f^* : Modifizierte spezifische Porosität

q_1, q_2, q_3 : Tvergaard-Needleman Anpassungsparameter

Der GTN-Ansatz muss weiterhin auf seine Anwendbarkeit ausführlicher geprüft werden, denn das mit Gleichung (8) beschriebene Modell weist noch unbekannte empirische Anpassungsparameter q_1, q_2, q_3 auf, welche dazu dienen, die Simulationsergebnisse an die Experimente anzupassen. Diese Parameter können nicht ohne weitere Experimente ermittelt werden. Außerdem ist die modifizierte spezifische Porosität f^* noch unbekannt, welche ebenfalls material spezifisch ist [38].

3 Beschreibung der theoretischen Ansätze

In diesem Kapitel werden die verschiedenen Degradationsmechanismen und die durchzuführenden Simulationskonzepte für die Rissbildung beschrieben. Die Methode der finiten Elemente wird bündig erläutert. Die thermisch-elektrisch-mechanische Simulation und die Methode der Stressberechnung unter Berücksichtigung des Herstellungsprozesses werden vorgestellt. Außerdem werden die Technik der Submodellierung und der Simulationsansatz zur Diffusionsberechnung in semi-porösen Barrieren erläutert, anschließend werden die wichtigen Parameter geklärt.

3.1 Unterschiedliche Degradationsmechanismen

In der Anwendung der integrierten Schaltungen bedeutet die Zuverlässigkeit die Aufrechterhaltung der Produktfunktionalität innerhalb der erwarteten Lebensdauer. Um die Zuverlässigkeit der Schaltungen zu prüfen wurden beschleunigte Belastungstests der Elektromigration und Stressmigration entwickelt, bei denen eine erhöhte Belastung bezüglich der Temperatur und Stromeinprägung gewählt wird. Die Haupteffekte, die bei diesen Tests zur Beeinträchtigung der Zuverlässigkeit von ULSI-Metallisierungsstrukturen beitragen, sind unter anderem die Lochbildung oder Materialansammlung infolge der Elektromigration und Stressmigration sowie die Kupferdiffusion durch die Barrieren, welche zur Degradation der Isolation führen kann. Die Hauptmechanismen der Degradation und deren Auswirkung sind in der Tabelle 3.1 aufgelistet.

Degradationsmechanismus	Folge	Auswirkung auf die Schaltung
Elektromigration	Lochbildung	Leitbahnunterbrechung Widerstandssteigerung
	Hillockbildung	Kurzschluss zwischen Leitbahnen
Stressmigration	Lochbildung	Leitbahnunterbrechung Widerstandssteigerung
Hoher Stress in der Durchkontaktierung, Degradation der Isolation	Porosität, Kupferdiffusion	Erhöhung der Leckströme
		Kapazitätsdrift der Leitbahnkonstruktion

Tab. 3.1: Hauptmechanismen der Degradation und deren Auswirkung in Cu-Metallisierungen [46, 57].

Ein weiterer Degradationsmechanismus ist der „Soret-Effekt“. Dieser Effekt ist eine durch Temperaturgradienten induzierte Diffusion, welcher auch als die Thermomigration bezeichnet wird. Wenn ein Material einem angemessenen Temperaturgradienten ausgesetzt ist, kommt es zu einem Materialtransport. Die Atome diffundieren bei Kupfer bevorzugt zum heißeren Ende

des Materials [46]. Aufgrund der gewählten Randbedingung bei den beschleunigten Stresstests ergibt sich nur eine Temperaturerhöhung von ca. 1-2 K. Die Temperaturgradienten sind daher zu klein um den Soret-Effekt berücksichtigen zu müssen.

3.2 Physikalischer Hintergrund

Die lokale Bewegung von Atomen führt in gerichteter Form infolge unterschiedlicher Triebkräfte zum Massenfluss in der Cu-Metallisierung.

3.2.1 Hintergrund der Elektromigration

Unter Diffusion im festen Zustand versteht man die Bewegung von Atomen in einem Material. Die Diffusion setzt existierende Leerstellen und aktivierte Atome voraus. Ein aktiviertes Atom verlässt seinen Platz im Kristallgitter erst nach dem Zufügen einer bestimmten Aktivierungsenergie der Diffusion (E_A) aufgrund thermischer Gitterschwingungen. Die Wahrscheinlichkeit des Platzwechsels nimmt mit steigender Temperatur und sinkender Aktivierungsenergie zu. Der beschleunigte Elektromigrationstest erfolgt bei einer erhöhten Substrattemperatur von 300-350°C. Der Diffusionskoeffizient D hängt proportional von der Diffusionskonstante D_0 und exponentiell von der Aktivierungsenergie der Diffusion sowie der Temperatur ab. Allgemein wird der Diffusionskoeffizient D über bestimmten Temperaturbereich in folgender empirischer Arrhenius-Gleichung beschrieben:

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{k_B T}\right) \quad (8) \quad ; \text{ mit}$$

E_A : Aktivierungsenergie der Diffusion

k_B : Boltzmannkonstante

D_0 : Diffusionskonstante

T : Temperatur

Unter Elektromigration versteht einen diffusionsgesteuerten Prozess, bei dem es aufgrund der Impulsübertragung der Leitungselektronen auf die Atomrümpfe zu einer gerichteten Materialbewegung kommt. In einer stromdurchflossenen Leiterbahn wirkt zum einen die elektrostatische Kraft (F_{el}), welche die positiv geladenen Metallionen aufgrund des elektrischen Feldes in Richtung Kathode anzieht, und zum anderen die Kraft des Elektronwindes (F_p), die dem äußeren elektrischen Feld entgegengesetzt gerichtet ist. Die

resultierende Kraft F_{EM} gibt bei der Elektromigration die Vorzugsrichtung vor und wird wie folgt beschrieben:

$$F_{EM} = F_{el} + F_p = Z^* \cdot e \cdot \rho \cdot \vec{j} \quad (9); \text{ mit}$$

Z^* : Effektive Ladungszahl

e : Elementarladung

ρ : Spezifischer Widerstand

\vec{j} : Stromdichte.

Abhängig von dem Vorzeichen von Z^* kann die Elektromigration in Richtung des elektrischen Feldes oder diesem entgegengesetzt gerichtet erfolgen, jedoch besitzt Z^* bei den meisten Metallen ein negatives Vorzeichen [46]. Der spezifische Widerstand ρ ist abhängig von der Temperatur:

$$\rho = \rho_0 \cdot [1 + \alpha_T \cdot (T - T_0)] \quad (10); \text{ mit}$$

α_T : Temperaturkoeffizient des spezifischen Widerstandes (TCR).

Der Massenfluss durch Elektromigration wird aus der treibenden Kraft F_{EM} aus Gleichung 9 und 10 durch Einsetzen erhalten:

$$\vec{J}_{el} = \frac{D \cdot N}{k_B \cdot T} Z^* \cdot e \cdot \rho_0 \cdot [1 + \alpha_T \cdot (T - T_0)] \cdot (\vec{j} - \vec{j}_{TH}) \quad (11); \text{ mit}$$

N : Atomdichte des Materials

D : Diffusionskoeffizient

\vec{j}_{TH} : Schwellstromdichte

Die Gleichung (11) besteht aus einem skalaren Vorfaktor und dem Vektor der Stromdichte $\vec{j} - \vec{j}_{TH}$. In ULSI-Strukturen besteht eine Schwellstromdichte, bei der die Elektromigration einen größeren Degradationseffekt als die Stressmigration zeigt [65]. Jedoch ist die Schwellstromdichte betragsmäßig viel kleiner als die Stromdichte. Unter Verwendung der Produktregel aus der Integraltafel $\text{div}(u \cdot \vec{v}) = (\text{grad } u, \vec{v}) + u \cdot \text{div } \vec{v}$, lässt sich die Divergenz des Massenflusses durch Elektromigration wie folgt beschreiben [6]:

$$\text{Div}(\vec{J}_{el}) = \left(\frac{E_A}{k_B \cdot T^2} + \frac{\alpha_T \rho_0}{\rho} - \frac{1}{T} \right) \cdot \vec{J}_{el} \cdot \text{grad}(T) \quad (12)$$

Ein großer Betrag des Massenflusses kann die Zuverlässigkeit der Metallisierung nicht beeinträchtigen, solange dieser gleichmäßig über die Leiterbahn verteilt ist. Erst wenn Unterschiede der lokalen Massenflüsse und somit die Divergenzen entstehen, kommt es zu

einer Degradation durch Elektromigration. In Bezug auf die Kontinuitätsgleichung des Massentransportes führen positive Massenflussdivergenzen zur Materialverarmung und negative Massenflussdivergenzen zu einer Materialanhäufung. Der Mechanismus der Elektromigration wird in Bild 3.1 schematisch dargestellt.

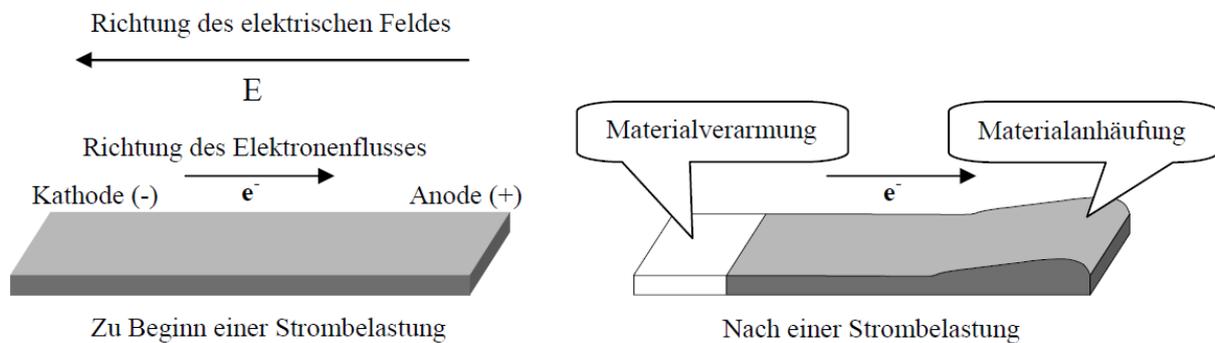


Bild 3.1: Schematische Darstellung der Elektromigrationsschädigung nach einer Strombelastung [22].

3.2.2 Hintergrund der Stressmigration

Unter Stressmigration versteht man die Bewegung von Atomen, bei denen die treibende Kraft für den Materialtransport die Gradienten der mechanischen Spannungen sind. In einer unter tensilem Stresszustand stehenden Korngrenze reduziert sich die Bildungsenthalpie für die Leerstellen, welche die Leerstellenkonzentration erhöht [57]. Weiterhin entstehen bei tensilem Stress Löcher, welche in Richtung der Stressgradienten wandern. Bei kompressivem Stress ist die Lochbildung weitgehend unterdrückt. Der Entstehungsmechanismus der Stressmigrationsschädigung wird in vier Schritte unterteilt und ist in Bild 3.2 veranschaulicht.

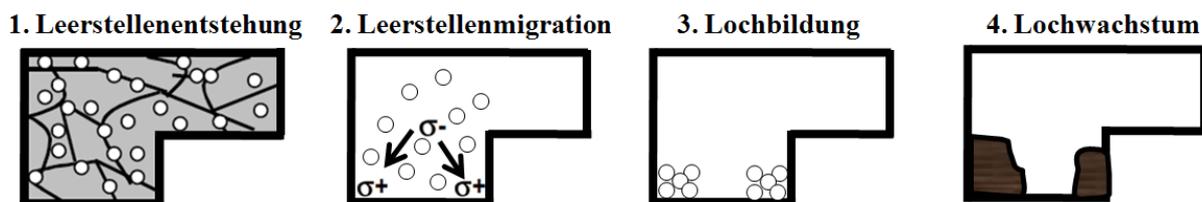


Bild 3.2: Schematische Darstellung der Stressmigrationsschädigung durch die Stressgradienten.

Schon bei der Abscheidung entstehen Leerstellen im Cu-Gefüge. Nach der Abscheidung erfolgt eine Wärmebehandlung (das sogenannte Anealing), bei der zusätzliche Leerstellen infolge des Kornwachstums sowie der Rekristallisation entstehen können. Im Vergleich zu dem beschleunigten Elektromigrationstest erfolgt der beschleunigte Stressmigrationstest bei einer niedrigeren Temperatur. Bis zu einer Temperatur von etwa 175-225° C nimmt die Stressmigration zu. Die Zunahme der Stressmigration ist jedoch von dem Stresszustand der

Leiterbahnen begrenzt, welcher bei höherer Temperatur in den kompressiven Zustand übergeht. Diese Konstellation ergibt einen Temperaturwert, bei dem besonders hohe Stressmigration in der Leiterbahn auftritt. In Bild 3.3 ist beispielsweise die Migrationsrate abhängig von der Testtemperatur dargestellt [66].

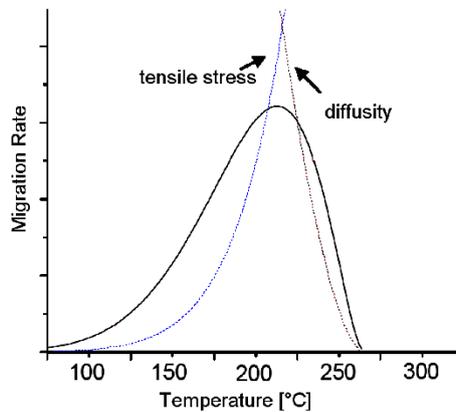


Bild 3.3: Beispiel für die Migrationsrate in Abhängigkeit von der Temperatur beim beschleunigten Stresstest [66].

Die Leiterbahnen sind bei dem Temperaturbereich von 175-225°C relativ stressfrei, da der tensile Zustand in den kompressiven Zustand übergeht. Die Temperatur für den Stressmigrationstest ist jedoch so zu wählen, dass die Leiterbahnen noch überwiegend im tensilen Zustand sind und man entsprechend einen hohen Diffusionskoeffizienten für die Stressmigration hat.

Durch die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten und E-Moduln der Materialien entsteht hydrostatischer Stress. Seine Stressgradienten werden durch die Unterschiede der lokalen hydrostatischen Stressverteilung hervorgerufen und zeigen als Vektoren wegen des Gradient-Operators stets in Richtung des tensilen Stresszustandes. Die Stressgradienten gelten bei der Stressmigration als die Triebkraft.

$$F_{SM} = -\Omega \cdot \text{grad}(\sigma_H) \quad (13); \text{ mit}$$

Ω : Atomares Volumen

Der resultierende Massenfluss durch Stressmigration wird wie folgt dargestellt:

$$\vec{J}_{Str} = -\frac{D \cdot N}{k_B \cdot T} \Omega \cdot \text{grad}(\sigma_H) \quad (14)$$

Den Stressgradienten entgegengesetzt erhalten die Atome die Vorzugsrichtung für die Stressmigration. Die Leerstellen wiederum bewegen sich in der dem atomaren Massenfluss entgegengesetzter Richtung, (Bild 3.4).

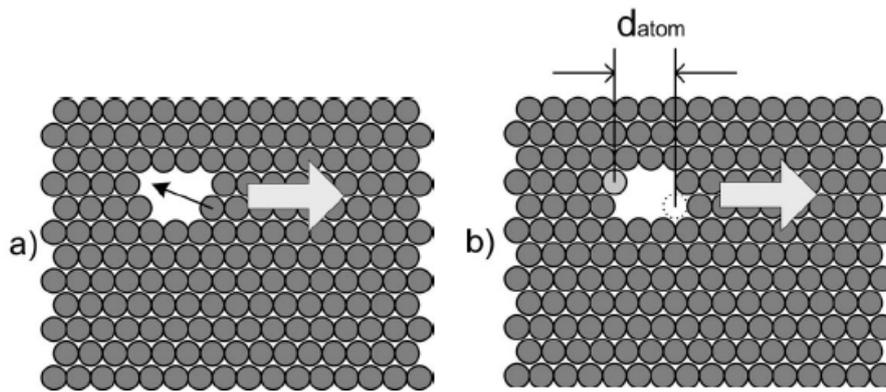


Bild 3.4: Die Bewegung von Leerstellen als Resultat der kontinuierlichen Versetzung der Atome, (a) vor der Atombewegung und (b) nach der Atombewegung [17].

Entscheidend ist bei der Stressmigration, dass sich die Löcher somit in Richtung des tensilen Stresses durch die Stressgradienten getrieben versetzen. Die Ansammlung von Löchern kann die Leiterbahn unterbrechen und verursacht einen Widerstandsanstieg. Unter Verwendung der Produktregel bei dem Divergenz-Operator erhält man die Divergenz der lokalen Massenflüsse durch die Stressmigration wie folgt:

$$\text{Div}(\vec{J}_{\text{Str}}) = \left(\frac{E_A}{k_B \cdot T^2} - \frac{1}{T} \right) \cdot \vec{J}_{\text{Str}} \cdot \text{grad}(T) - \frac{\Omega ND}{k_B T} \nabla \sigma_H \quad (15)$$

Die Zuverlässigkeit der Cu-Metallisierung wird entscheidend durch die Bildung und Wachstum von Löchern beeinflusst. Die mittlere Lebensdauer (MTF) ist nach der Black'scher Gleichung umgekehrt proportional zu der Summe der Massenflussdivergenz.

$$\text{MTF} \sim \frac{1}{\text{div}(\vec{J}_G)} \quad (16)$$

3.2.3 Diffusion des Cu in das intermetallische Dielektrikum

Mit dem Materialwechsel von Al ($\rho_{\text{Al}}=2.65\mu\Omega\text{cm}$) zum niederohmigen Cu ($\rho_{\text{Cu}}=1.74\mu\Omega\text{cm}$) für ULSI-Schaltungen erhält man zunächst eine Reduzierung des Leitbahnwiderstandes um ca. 35%. Cu zeichnet sich weiterhin durch die höhere Beständigkeit gegen Elektromigration im Vergleich zu Al und Al-Legierungen aus. Trotzdem ist es bekannt, dass Cu-Atome durch ihren hohen Diffusionskoeffizienten schnell in das Si-Substrat und in das umgebende Dielektrikum (z.B. SiO_2 , SiCOH) diffundieren können [57].

In Bild 3.5 ist die Ausdiffusion des Cu in benachbarten Leiterbahnen einer ULSI-Metallisierungsstruktur schematisch dargestellt.

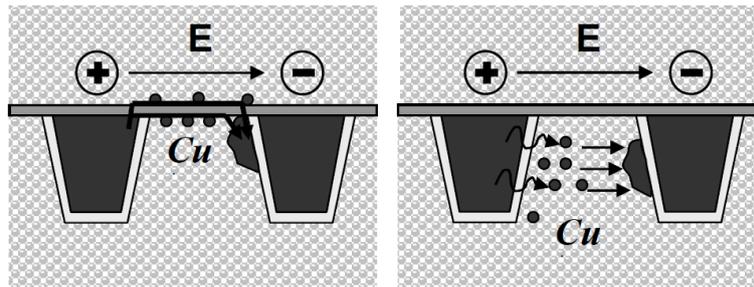


Bild 3.5: Ausdiffusion des Cu in das intermetallische Dielektrikum [22].

Am linken Teil des Bildes 3.5 erkennt man ein Szenario, bei dem das Cu durch die Diffusionsbarriere durchdiffundiert und entlang der Grenzfläche der Deckschicht weiter migriert. Das Interface zwischen Deckschicht und dem Dielektrikum stellt sich hier als möglicher Diffusionspfad dar. Daraus folgen eine Cu-Anhäufung entlang der Deckschicht und ein Kurzschluss der benachbarten Leiterbahnen. Am rechten Teil des Bildes 3.5 erkennt man das zweite Szenario, in dem Cu direkt durch die Diffusionsbarriere hindurch diffundiert, wobei dies insbesondere am Boden der Durchkontaktierung zu erkennen ist. Diese Art der Ausdiffusion des Cu kann einerseits zur Degradation der Isolationseigenschaften des Dielektrikums führen, andererseits kann es bei lokalen Interconnects zu einer Verunreinigung der aktiven Siliziumgebiete kommen, wo sich durch Bildung tiefer Strörstellen der Wirkungsgrad des Bauelementes (z.B. Transistor) reduziert oder das Bauelement dadurch komplett ausfällt [22]. In dieser Arbeit liegt der Schwerpunkt in der Untersuchung poröser Barriere speziell am Boden der Durchkontaktierung. Eine wichtige Annahme in dieser Arbeit besteht darin, dass die semi-poröse Barriere durch den hohen Stress im Bereich des Bodens der Durchkontaktierung infolge des Herstellungsprozesses zu Stande kommt. Die Annahme liegt darin begründet, dass eine unterbrochene Ta-Barriere, wie im Bild 2.3 schon gezeigt wurde, auch bei einer anderen Struktur der Durchkontaktierung mit doppelter SiN-Deckschicht ebenfalls nach der Herstellung der Durchkontaktierung entstanden ist. Das Bild 3.6 stellt die unterbrochene Ta-Barriere mit doppelter SiN-Schicht dar.

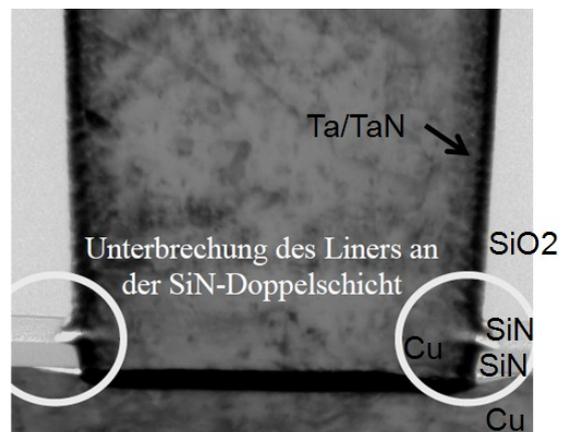


Bild 3.6: Unterbrochene Ta-Barriere bei der Herstellung einer 180nm-Technologie mit SiN-Doppelschicht [22].

Im Zuge der Skalierung der Technologieknoten auf 65nm trat der Effekt der Barrierenreduzierung bzw. -verluste insbesondere im Bereich des Bodens der Durchkontaktierung noch stärker auf. Durch die Optimierung des Herstellungsprozesses reduziert sich die Schichtdicke der Ta/TaN-Barriere am Boden der Durchkontaktierung, sodass eine Diffusion durch die Barriere an einigen Stellen am Boden der Durchkontaktierung nicht mehr verhindert werden kann [7]. Ferner stellte man fest, dass sich bei der Abscheidung der Ta/TaN-Schichten Leerstellen an den Korngrenzen bilden, die zur Bildung von Nanosäulen bzw. porösen Schichten und damit möglichen Diffusionspfaden für Cu führen [12], s. Bild 2.4.

3.3 Theoretischer Hintergrund für die Simulation

3.3.1 Methode der Finiten Elemente

In der Regel können physikalische Vorgänge in der Technik durch mathematische Modelle bzw. Differentialgleichungen (DGL) beschrieben werden. Einige Beispiele, die man benennen kann, sind Verformungen von Bauteilen durch mechanische Belastungen, Strömungen von Gasen und Flüssigkeiten, elektromagnetische Felder, Temperaturfelder in festen Körpern, usw. Im Falle der Metallisierung ergibt sich die folgende Differentialgleichung als Resultat aus der Maxwellschen Gleichung und der Annahme, dass sich jedes Modell im thermischen Gleichgewicht befinden muss [28]:

$$\kappa \cdot \Delta T + \text{grad}(T) \cdot \text{grad}(\kappa) = -\frac{1}{\rho} \cdot (\text{grad } \Phi)^2 \quad (17)$$

Der thermische Leitwert κ und der spezifische Widerstand ρ sind temperaturabhängig. Beim Vorliegen des elektrischen Feldes wird die Gesamttemperatur T der Metallisierung zusätzlich von der Eigenerwärmung beeinflusst, die von dem Eingangsstrom I_{ein} und dem Widerstand zum Quadrat R^2 abhängig ist. Da jedoch die Eigenerwärmung der Struktur gering ist, wird die Höhe der Temperatur T hauptsächlich von der Substrattemperatur T_{sub} bestimmt.

Die DGL (13) kann man theoretisch für die gesamte Geometrie lösen. Jedoch wird man feststellen, dass nur in sehr wenigen einfachen Fällen die Lösung auf analytischen Weg erfolgen kann. Hierzu muss das technische Problem sehr weit vereinfacht und die Geometrie idealisiert werden. Daher ist die Lösung vielfach nur bedingt auf andere Aufgabenstellung übertragbar und somit ist der Einsatz von rechnerischer Simulation unerlässlich. Dies bedarf

der Überführung von dem im Gesamtgebiet geltenden Feldproblem in die sich in endlichen Teilgebieten erstreckenden Näherungsansatzfunktionen anhand der Methode der Finiten Elemente (FEM). Die FEM stellt sich als ein numerisches Näherungsverfahren dar, bei dem Lösungsansätze gewählt werden, die in den jeweiligen Teilgebieten gelten. Diese Teilgebiete werden als Elemente bezeichnet. Die Stellen, wo die Elemente aneinandergrenzen, bezeichnet man als Knoten. In die Knoten werden die physikalischen Größen bzw. Freiheitsgrade eingeführt. Bei elektrischen Feldern sind diese die elektrische Spannung und die Temperatur. Ferner schließen sich die Ansätze an den Grenzen kontinuierlich an die Nachbarelemente an. Die Lösung für das Gesamtgebiet wird aus den jeweiligen Lösungsansätzen der Elemente approximiert [29]. In der vorliegenden Arbeit wird stets die lineare Ansatzfunktion $t(x)$ des ersten Grades $\{ t(x) = a \cdot x + b \}$ verwendet. Hierzu wird der transiente Term der Zeitabhängigkeit nicht betrachtet, es werden ausschließlich der Anfangs- und Endzustand des atomaren Transportes berücksichtigt. Das Bild 3.7 stellt die Methode der Finiten Elemente im Falle eines Temperaturfeldes dar.

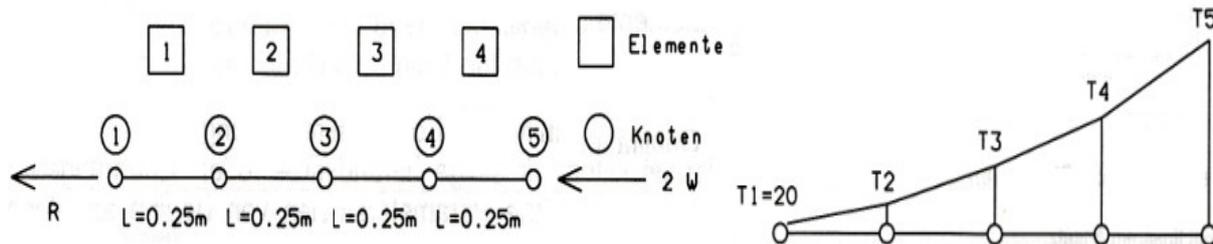


Bild 3.7: Diskretisierung und Approximation in der FEM im Falle eines Temperaturfeldes [29].

Bei der FEM erfolgt das Lösungsverfahren stets iterativ, indem eine Anfangsbedingung für b in $t(x)$ angesetzt wird. Berücksichtigt man die bereits aus der Geometrie bekannte Kantenlänge der Elemente L , wandeln sich die Ansatzfunktionen in Formfunktionen $N(x)$ um. Setzt man am Beispiel des Temperaturfeldes aus dem Bild 3.7 die Knotentemperaturen T_1 ($x=0$) und T_2 ($x=L$) in die Ansatzfunktion ein, ergibt sich durch Umrechnung $b = T_1$ und $a = (T_2 - T_1)/L$. Somit erfolgt die Temperaturverteilung im Element:

$$T(x) = \left(T_1 + \frac{T_2 - T_1}{L} \cdot x \right) = \left(\frac{T_2}{L} \cdot x + T_1 - \frac{T_1}{L} \cdot x \right) = \left(1 - \frac{x}{L} \right) \cdot T_1 + \left(\frac{x}{L} \right) \cdot T_2$$

$$T(x) = N_1(x) \cdot T_1 + N_2(x) \cdot T_2 \quad (18)$$

In Matrixschreibweise lassen sich die Formfunktionen wie folgt beschreiben:

$$[N] = [N_1; N_2] = \left[1 - \frac{x}{L}; \frac{x}{L} \right] \quad (19)$$

Nun wird nach dem Prinzip des Minimums der potentiellen Energie die Formfunktionen für jedes Element abgeleitet und in die DGL wieder eingesetzt. Durch Intergration erhält man die erforderliche Teilmatrix $[k]$ zur Bestimmung des gesuchten Freiheitsgrades. Durch Anschließen der erforderlichen Teilmatrizen erhält man für das Gesamtgebiet die sogenannte Leitfähigkeitsmatrix $[K]$. Somit wird die DGL durch lineare Approximation in folgender Form angenähert:

$$\vec{Q} = [K] \cdot \vec{x} \quad (20)$$

Q ist ein Lastvektor, welcher durch die Randbedingung der Simulation beschrieben wird und x sind die zu ermittelnden Freiheitsgrade. Abhängig von der Simulationsart wird die Leitfähigkeitsmatrix mit Leitwerten oder Steifigkeitswerten besetzt. Durch Invertierung der Matrix $[K]$ und Umstellung von (20) nach x , erhält man die gesuchten Freiheitsgrade für jedes Element. Die Erhöhung der Genauigkeit erreicht man durch höhere Anzahl der Elemente, auch unter dem Begriff „Vernetzung“ bekannt. Jedoch ist eine feinere Vernetzung bei linearen Ansatzfunktionen stets mit einer höheren Rechenzeit verbunden. Am Ende ergibt sich durch Verknüpfung der Felder in jedem Element das gesuchte Feld für die gesamte Geometrie [29].

3.3.2 Simulationsablauf in ANSYS®

In der vorliegenden Arbeit wird das FEM-Programm ANSYS® eingesetzt. Der Simulationsablauf wird in drei Schritte unterteilt und ist in Bild 3.8 schematisch dargestellt.

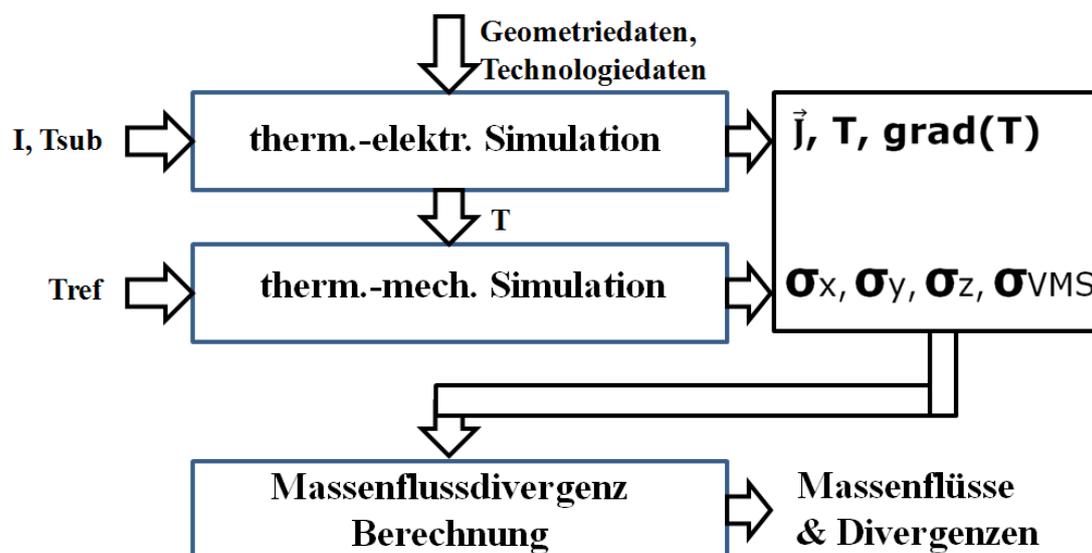


Bild 3.8: Schematische Darstellung des Simulationsablaufs in ANSYS®.

Thermisch-elektrische Berechnung

Aus dem Bild 3.8 geht hervor, dass die Gesamtsimulation aus vier Phasen besteht, nämlich aus der thermisch-elektrischen und thermisch-mechanischen Simulation, aus der Migrationsberechnung und der Ergebnisdarstellung. Nachdem die Geometrie mit den erforderlichen Materialparameter modelliert wurde, erfolgt die thermisch-elektrische Simulation. Durch Anlegen einer Substrattemperatur (T_{sub}) und eingepprägten Stromdichte (J_{ein}) wird das elektrische Feld mit der Temperaturverteilung infolge der jouleschen Eigenerwärmung in der stromdurchflossenen Leitbahn berechnet. Diese Eigenerwärmung ist proportional zu dem Strom und Widerstand zum Quadrat in der Leiterbahn.

$$Q \sim I^2 \cdot R \quad (21)$$

Als Simulationselement in diesem Berechnungsschritt wurde das Solid 69 genommen. Es ist ein dreidimensionales Element für thermisch-elektrisch gekoppelte Feldberechnung mit Temperatur und elektrische Spannung als Freiheitsgrade. Das Element besitzt acht Knoten, welche im dreidimensionalen Fall der linearen Approximation entsprechen.

Thermisch-mechanische Berechnung

Das berechnete Temperaturfeld wird dann in die nachfolgende thermisch-mechanische Berechnung geladen. Durch mechanischen Fixierung der Struktur und Anlegen unterschiedlicher Prozesstemperaturen wird die thermisch induzierte Ausdehnung in jedem Knoten berechnet, welche aus dem unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten (θ) und der Differenz der berechneten Temperatur zu der Temperatur des stressfreien Zustandes (T_{ref}) ermittelt wurde. Der stressfreie Zustand repräsentiert hier den Bezug zur berechneten Verspannung.

$$\varepsilon_{\text{Therm}} = \theta \cdot (T_{\text{ref}} - T) \quad (22)$$

In der Stressberechnung wurde das dreidimensionale Simulationselement Solid 45 gewählt. Es ist ein Element mit acht Knoten und Knotenverschiebung als Freiheitsgrade. Das Element erlaubt den „Birth and Death“ Algorithmus, welcher in der Stressberechnung bei Berücksichtigung des Herstellungsprozesses Anwendung findet.

T_{ref} ist eine Referenztemperatur für die Stressberechnung, bei der theoretisch kein Stress in dem betrachteten Material induziert wird. Für die Berechnung bedeutet es, wenn die berechnete Temperatur unterhalb der T_{ref} liegt, dehnen sich die Materialien aus, da ein tensiler Zustand vorherrscht. In dem Moment resultiert ein tensiler Stress. Liegt die Temperatur höher

als die T_{ref} wird sich das Material zusammenziehen. Es ergibt sich ein kompressiver Stress. Das Bild 3.9 zeigt beispielhaft eine ideale lineare Abhängigkeit des Stresses von der Differenz der Temperatur zu der Referenztemperatur.

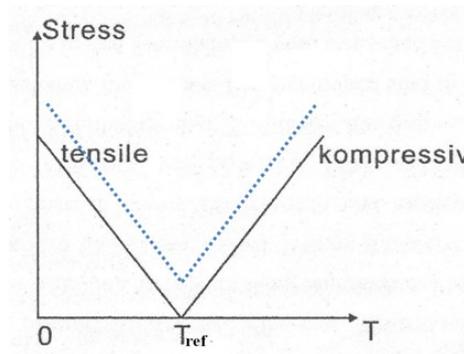


Bild 3.9: Abhängigkeit des Stresses von der Differenz der Referenztemperatur zur der Temperatur.

In Bezug auf die Prozesssimulation findet man bei der T_{ref} aufgrund der unterschiedlichen Prozesstemperatur und der Komplexität der Struktur jedoch nur einen nahezu stressfreien Zustand. Dies wird von der gestrichelten Linie im Bild 3.9 widerspiegelt.

Migrationsberechnung und Ergebnisdarstellung

Im weiteren Ablauf werden die für die Migrationsberechnung erforderlichen Berechnungsgrößen aus den vorigen Berechnungsschritten extrahiert. Die Stressgradienten, Massenflüsse und Massenflussdivergenzen infolge der Elektro- sowie Stressmigration werden dann im externen Programm ermittelt. Schließlich werden die Ergebnisse wieder in den Postprozessor von ANSYS® geladen, damit sie in jedem Element des Berechnungsmodells bildlich dargestellt werden können.

3.3.3 Stressfeld in Cu-Metallisierungsstrukturen

Die Cu-Metallisierungsstruktur besteht aus unterschiedlichen Materialschichten mit verschiedenen thermischen Ausdehnungskoeffizienten, E-Moduln und Poissonzahlen. Die Unterschiede der mechanischen Eigenschaften rufen Stress beim Vorliegen einer bestimmten Prozess- oder Testtemperatur hervor. Allgemein ist der Stress in Metallisierungsstrukturen proportional zum E-Modul und zur thermisch induzierten Ausdehnung ε_{Therm} , die Herleitung des thermischen Stresses erfolgt folgendermaßen:

$$\sigma = \varepsilon \cdot E = E \cdot l_0 / l \cdot 1 / (1 - \nu) \quad (23)$$

$$\sigma_{Therm} = \frac{E}{1 - \nu} \cdot \theta \cdot (T_{ref} - T) \quad (24)$$

Hydrostatischer und deviatorischer Anteil

Betrachtet wird ein fester Körper mit einem vorbestimmten Koordinatensystem, welcher durch eine bestimmte Kraft belastet wird. In jedem infinitesimal kleinen Flächenelement dA resultiert ein Gesamtstress σ_{Ges} , welcher in Hauptstresskomponente $(\sigma_{1,2,3})$ und Schubstresskomponente τ aufgeteilt werden kann. Das dreidimensionale Stressfeld wird wie folgt hergeleitet:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_x & \tau_{xy} & \tau_{xz} \\ \tau_{yx} & \sigma_y & \tau_{yz} \\ \tau_{zx} & \tau_{zy} & \sigma_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} \quad (25)$$

Der resultierende Stress führt bei dem festen Körper zur bestimmten Volumenausdehnung, welche in die Volumenänderung und die Gestaltsänderung aufgeteilt werden kann. Das Bild 3.10 stellt die zwei Arten der Volumenausdehnung infolge einer Stressbelastung in einem festen Körper dar.

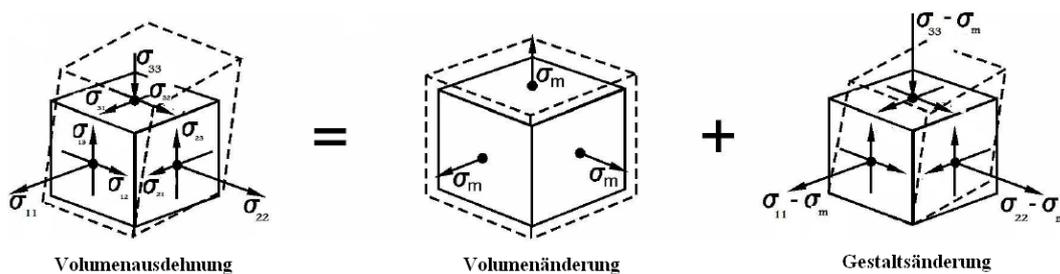


Bild 3.10: Volumenänderung und Gestaltsänderung infolge Stressbelastung [30, 58].

Durch die Transformation der Matrix (25) lässt sich für jeden beliebigen Punkt ein bestimmtes Koordinatensystem finden, in dem die Schubkomponenten zu Nullen werden. Es ändert sich jedoch nichts an der Volumenausdehnung, die sich aus der Stressbelastung ergibt.

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 \end{bmatrix} \quad (26)$$

$\sigma_{1,2,3}$ sind die Hauptspannungen (im Englischen: Principal Stress), welche den hydrostatischen Anteil einer Stressbelastung beschreiben. Der hydrostatische Anteil ist verantwortlich für die in Bild 3.10 dargestellte Volumenänderung entlang der Lastachse. Der hydrostatische Stress σ_H wird als der Mittelwert dieser Hauptspannungskomponente σ_m definiert, wie folgt:

$$\sigma_H = \sigma_m = \frac{\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3}{3} \quad (27)$$

An Bild 3.10 erkennt man weiterhin den Anteil der Gestaltsänderung bzw. den deviatorischen Anteil, indem die Werte des hydrostatischen Stresses von dem Stressfeld wieder abgezogen werden. Man ermittelt dann die charakteristische Gleichung des Tensors und erhält die Von Mises Vergleichsspannung σ_V wie folgt:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 - \sigma_H & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_2 - \sigma_H & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_3 - \sigma_H \end{bmatrix} \quad (28)$$

$$\lambda^3 - J_1 \lambda^2 + J_2 \lambda - J_3 = 0 \quad (29)$$

$$\sigma_V = \sqrt{3J_2} = \sqrt{\frac{1}{2} \cdot [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2]} \quad (30)$$

Liegt ein Stresszustand so vor, dass die Hauptspannungen den selben Wert σ aufweisen, würden ein Von Mises Stress $\sigma_V=0$ und hydrostatischer Stress $\sigma_H=\sigma$ ergeben. Daraus folgt, dass die Von Mises Vergleichsspannung den deviatorischen Anteil einer Volumenausdehnung infolge Stressbelastung widerspiegelt.

Der Von Mises Stress wird in dieser Arbeit für die Auswertung der Schubbelastung der Ta-Barriere am Boden der Durchkontaktierung herangezogen. Die hydrostatische Stressverteilung ist für diese Arbeit sehr interessant, da sich die Lochbildung meistens an der Stelle des maximal tensilen hydrostatischen Stresses befindet und die lokalen Änderungen dieses Stresses die hydrostatischen Stressgradienten hervorrufen. Die Stressgradienten sind die treibende Kraft für den Massenfluss durch die Stressmigration.

3.3.4 Technik der Submodellierung

Aufgrund der Geometriekomplexität der Metallisierungsstrukturen und dessen Einfluss auf die Stressentwicklung bedarf die Untersuchung einer abgegrenzten Analyse im Bereich des Bodens der Durchkontaktierung mit Hilfe von sogenannten Submodellen. Bislang erfolgt die FEM-Betrachtung für die gesamte Metallisierungsstruktur. Durch die Submodelltechnik in ANSYS® wird eine genauere Untersuchung der Stressentwicklung mit Interpolation der Randbedingungen aus der Gesamtstruktur ermöglicht. Geometrisch kritische Stellen wie z.B. Abrundungen und Ecken können durch mehr Knoten genauer modelliert werden. Die Submodelltechnik wird hier erstmalig für die Analyse kritischer Regionen am Boden der Durchkontaktierung eingesetzt.

Simulationstechnischer Hintergrund

Die Submodelltechnik wird in zwei maßgebenden Schritten durchgeführt. Die gesamte Struktur wird in Schritt 1 mit einer angemessenen Vernetzung simuliert. In Schritt 2 wird der Detailbereich, in diesem Fall im Bereich des Bodens der Durchkontaktierung, mit einer sehr feinen Vernetzung getrennt modelliert. Bild 3.11 zeigt das Flussdiagramm der Submodelltechnik in ANSYS®.

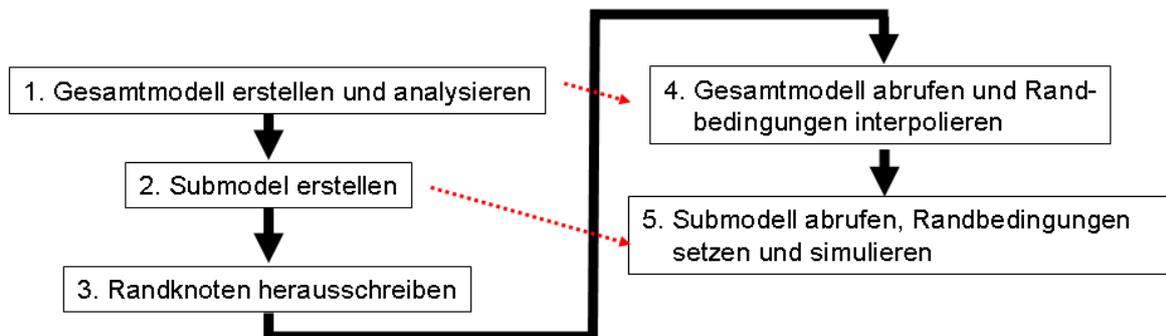


Bild 3.11: Flussdiagramm der Submodelltechnik in ANSYS® [25].

Die Simulation des Gesamtmodells wird gemäß dem erwähnten Simulationsablauf durchgeführt. Im Anschluss daran wird das Submodell im gewünschten Bereich modelliert und die Randknoten werden herausgeschrieben. Aus den Ergebnis- und Strukturdateien werden die neuen Randbedingungen in die Randknoten des Submodells interpoliert. Um eine korrekte Interpolation durchzuführen, sind die folgenden Punkte zu beachten:

- Das Submodell muss den gleichen Koordinatenursprung und das gleiche Koordinatensystem wie das Gesamtmodell haben.
- Das Submodell und das Gesamtmodell müssen einen identischen Elementtyp aufweisen.
- Den Materialparametern müssen temperaturabhängige Werte zugewiesen werden.

Im letzten Schritt wird das Submodell abgerufen und mit den interpolierten Randbedingungen simuliert. Das Bild 3.12 stellt als Beispiel die Metallisierung als das Gesamtmodell und den Boden der Durchkontaktierung als das Submodell dar. Für den ausgewählten Bereich des Bodens der Durchkontaktierung ergeben sich in dieser Untersuchung insgesamt ca. 90.000 Knoten für das Submodell. Das Gesamtmodell umfasst ca. 35.000 Knoten in der Cu-Metallisierung [25].

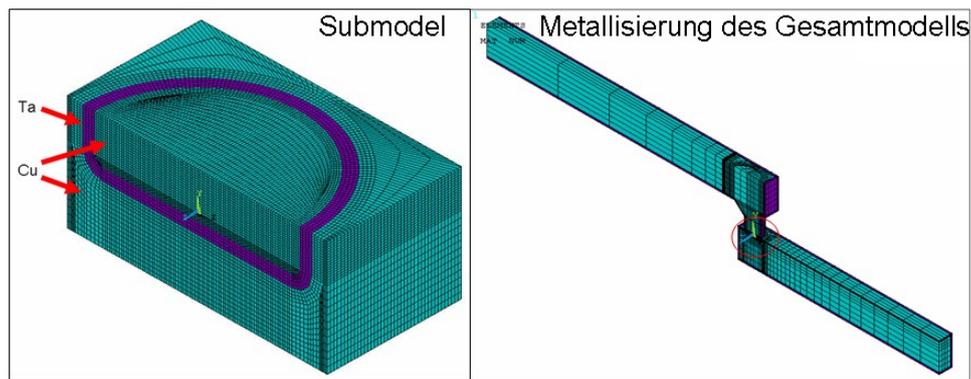


Bild 3.12: Vernetzung des Submodells und Gesamtmodells [25].

3.3.5 Simulationsansatz zur Berechnung der Diffusion in semi-porösen Medien

Durch die Technik der Submodellierung ist weiterhin eine lokale Berechnung der Diffusion am Boden der Durchkontaktierung ermöglicht. Ein Ansatz zur Ermittlung des Diffusionskoeffizienten in einem porösen Medium wurde recherchiert, dieser lautet aus [39] wie folgt:

$$D_{Porous} \geq \frac{\varepsilon_p}{\tau_p} D \quad (34)$$

Dieser Ansatz stammt ursprünglich aus der Geologie, die Annahme wurde durch zahlreiche Experimente belegt und zum Einsatz bei rechnergestützten Verfahren übernommen. Unter der Porosität ε_p versteht man das Verhältnis des Hohlraumvolumens zu dem gesamten betrachteten Volumen. Die Tortuosität τ_p ist der effektive zurückgelegte Transportweg eines Atoms um durch ein Medium durch zu diffundieren. Dieser wird durch die Dicke des porösen Mediums geteilt. Bei einer bekannten Porosität von weniger als 50% bzw. semi-porösen Medien kann die in Gleichung (35) angegebene empirische Formel einen guten Anpassungswert der Tortuosität wiedergeben [39].

$$\tau_p = \varepsilon_p^{-0.4} \quad (35)$$

Um die Migrationseffekte in der semi-porösen Ta-Barriere am Boden der Durchkontaktierung zu simulieren, müssen die anderen Simulationsparameter für die Cu-Durchdiffusion bekannt sein, u.A. die Aktivierungsenergie E_A der Cu-Diffusion in Ta-Matrix, die Diffusionskonstante D_0 der Cu-Diffusion in Ta-Schichten und die effektive Ladungszahl Z^* . Darüberhinaus wird im Weiteren die Porosität der Ta-Barriere durch die Ermittlung des Porositätsfaktors ε_p/τ_p gezielt am Boden der Durchkontaktierung anhand der Submodellierungstechnik ermittelt

werden. Außerdem erfolgt die Charakterisierung der Porosität bei verschiedenen Viamodellen.

Ermittlung der Aktivierungsenergie der Cu-Diffusion in Ta-Schichten

Die atomare Bewegung von Cu in Ta-Schichten ist exponentiell umgekehrt abhängig von der Aktivierungsenergie, daher stellt sich die Aktivierungsenergie als ein wichtiger Parameter für die Berechnung der Diffusion. Der Verlauf der Aktivierungsenergie der Cu-Diffusion in Ta wurde auf der atomaren Ebene in Ta (kubisch raumzentriert) über das Interface und Bulk berechnet und anschließend in einem Diagramm aufgezeichnet [4]. In Bild 3.13 ist die Aktivierungsenergie der Cu Diffusion über dem Interface zwischen einem bcc-Ta und Cu dargestellt.

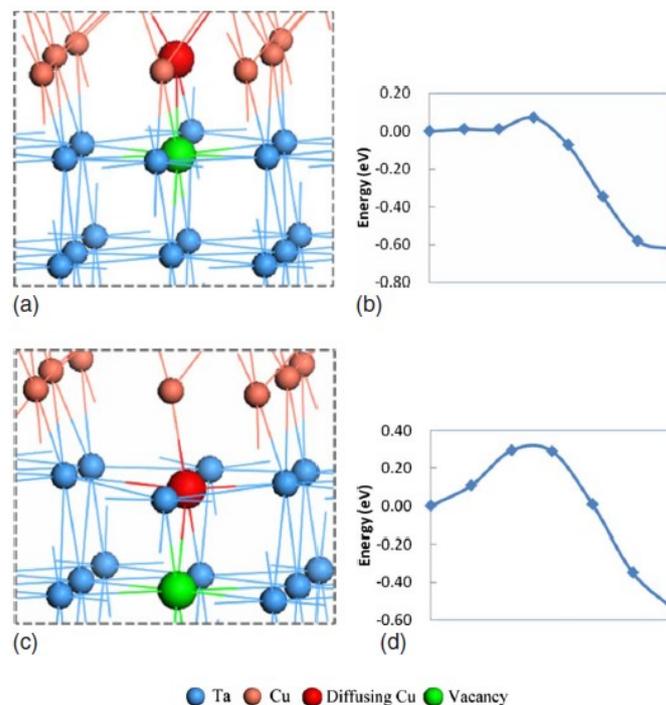


Bild 3.13: Diffusion von Cu in einem Cu/bcc-Ta Interface [4].

In der in Bild 3.13a dargestellten Simulation wurde zuerst eine Leerstelle auf der Oberkante der Ta-Schicht eingeführt. Ein Cu-Atom diffundiert in die Ta-Leerstelle mit einer wenigen Aktivierungsenergie von 0.07 eV und im Endzustand mit Aktivierungsenergie von 0.63 eV, wie im Bild 3.13b dargestellt. Basierend auf dem Endzustand wurde eine zweite Leerstelle in der tieferen Ta-Schicht eingeführt (Bild 3.13c). Das Cu-Atom bewegt sich von der ersten zu der zweiten Leerstelle mit einer Energiebarriere von 0.29 eV und einem Energieabfall von 0.54 eV, wie im Bild 3.13d dargestellt. Das Simulationsergebnis zeigt, dass Cu weiter in Ta

mit einer steigenden Aktivierungsenergie und sinkendem Energieabfall diffundieren kann. Der Diffusionsvorgang im Bulk wird jedoch dadurch erschwert.

In Bild 3.14 wird das Berechnungsergebnis der Aktivierungsenergie der Cu-Diffusion in einem bcc-Ta über dem Bulk in allen Kristallorientierungen dargestellt.

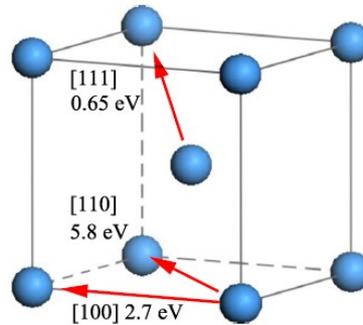


Bild 3.14: Aktivierungsenergie der Bulk-Cu-Diffusion in einem bcc-Ta entlang allen Richtungsorientierungen [4].

Ermittlung der Diffusionskonstante D_0 der Cu-Diffusion in Ta-Schichten

Um die Diffusionskoeffizienten der Cu-Diffusion in Ta-Schichten zu ermitteln, wurde eine Cu-Schicht und beide Ta- und TaN-Bariere auf ein 8-Zoll Siliziumwafer abgeschieden und von SiO₂ ummantelt [11]. Beide Ta- und TaN-Schichten waren 1 μm dick, um die Ermittlung des Cu-Profiles in der Barrierschicht zu ermöglichen. Für eine Testdauer von 1800 s wurden die beiden Proben in einem Temperaturbereich von 200 bis 600° C getempert. Das Tiefenprofil des Cu, Si, Ta/TaN und O in der Struktur wurde anschließend analysiert [11]. In Bild 3.15 ist das Tiefenprofil von Cu-Diffusion in Ta und in TaN dargestellt.

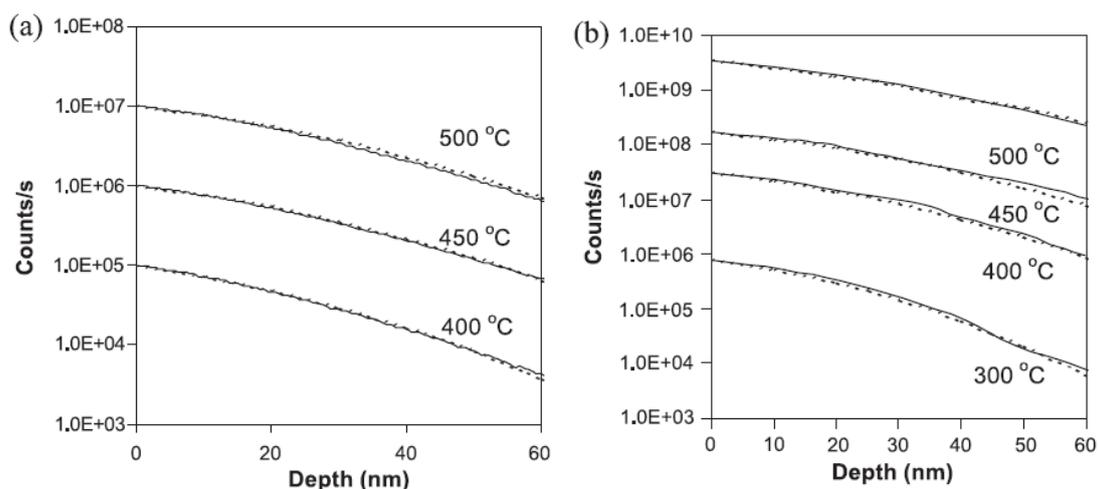


Bild 3.15: Abgleich zwischen Berechnung und Messung des Tiefenprofils von (a) Cu in Ta und (b) Cu in TaN [11].

Die X-Achse des Diagramms im Bild 3.15 repräsentiert die Diffusionstiefe von Cu in Ta/TaN. Die Punktlinie resultiert aus der theoretischen Berechnung und die durchgezogene Linie aus

Messung mit Sekundär-Ionen-Massenspektroskopie (SIMS). Das Bild 3.15a zeigt das Tiefenprofil von Cu in Ta in dem Temperaturbereich der Ausheilung von 400 bis 500° C, das Bild 3.15b stellt das Tiefenprofil von Cu in TaN bei einem Temperaturbereich von 300 bis 600° C dar. Durch den Abgleich zwischen Messung- und Berechnungsergebnissen kann der Diffusionskoeffizient D bei einer definierten Temperatur ermittelt werden. Allgemein wird der Diffusionskoeffizient D über einen definierten Temperaturbereich in folgender Form beschrieben:

$$D = D_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_A}{k_B T}\right) \quad (36) \quad ;$$

Die Gleichung (36) wird in (37) wie folgt umformuliert:

$$\ln D = \ln D_0 - \frac{E_A}{k_B T} \quad (37)$$

Da die Gleichung (37) jetzt nicht mehr exponentiell ist, kann daraus die Abhängigkeit des Terms $\ln D$ von dem Term $1/T$ bestimmt und auf einem Diagramm aufgezeichnet werden. In Bild 3.16 ist der Verlauf des Terms $\ln D$ über $1/T$ dargestellt. Der Schnittpunkt auf der $\ln D$ -Achse bestimmt den Wert $\ln D_0$, aus dem wiederum der Diffusionskoeffizient ermittelt werden kann.

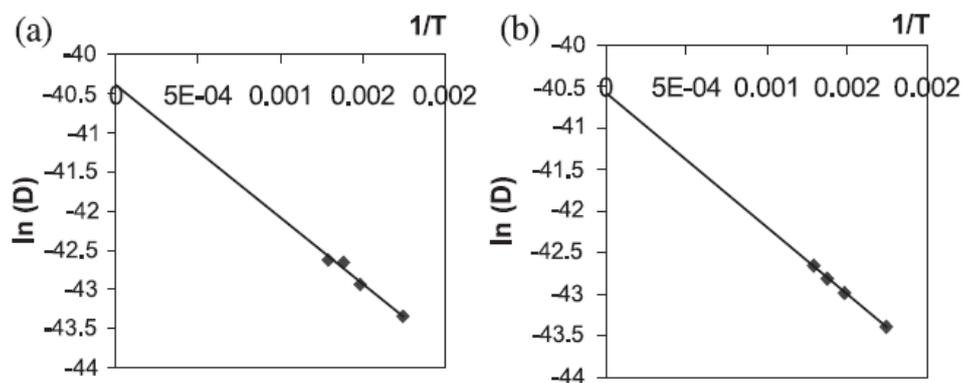


Bild 3.16: Diffusionskoeffizient von (a) Cu in Ta und (b) Cu in TaN [11].

Aus Bild 3.16 wurde eine Funktion des Diffusionskoeffizienten D von Cu in Ta von $2.87 \cdot 10^{-14} \exp(-0.1457 \text{ eV}/kT) \text{ cm}^2/\text{s}$ und von Cu in TaN von $2.4 \cdot 10^{-14} \exp(-0.1395 \text{ eV}/kT) \text{ cm}^2/\text{s}$ ermittelt. Hiermit stehen für die Simulationsanalyse von Cu-Diffusion in Tantal alle wichtigen Parameter zur Verfügung. Eine Voruntersuchung kann zunächst mit einem angepassten Z^* durchgeführt werden. Als Richtwert für die Anpassung von Z^* kann man sich das Verhältnis der Aktivierungsenergie der Cu-Diffusion in Ta-Schichten zu der Aktivierungsenergie der Cu-Selbstdiffusion gewählt werden.

4 Modellbeschreibung

In diesem Kapitel werden die für die Untersuchung der Durchkontaktierung verwendeten Modelle beschrieben. Hierzu gehören die Beschreibung der verwendeten Materialparameter sowie die Verifikation der Simulation der Modelle.

4.1 Variation der Dimensionierung der Durchkontaktierung

In der vorliegenden Arbeit wurden die Modelle von vier unterschiedlichen Durchkontaktierungen modelliert. Die Modelle wurden thermisch-elektrisch sowie mechanisch charakterisiert und im Bereich des Bodens der Durchkontaktierung in Bezug auf die Porosität der Ta-Barriere untersucht. In Bild 4.1 sind TEM-Bilder unterschiedlicher Durchkontaktierungsformen dargestellt. Das Modell, bei dem die Durchkontaktierung unmittelbar auf der Oberkante der unteren Metallisierung liegt, bezeichnet man im Weiteren als Flachmodell. Bei dem Einsinkmodell ist die Durchkontaktierung tiefer in die untere Metallisierung hineinversetzt. Das VModell hat eine V förmige und ebenfalls verankerte Durchkontaktierung. Das VRundmodell verfügt über einen komplett abgerundeten Boden der Durchkontaktierung. Die Bilder wurden der Literatur entnommen [6, 8, 18, 52, 53, 54].

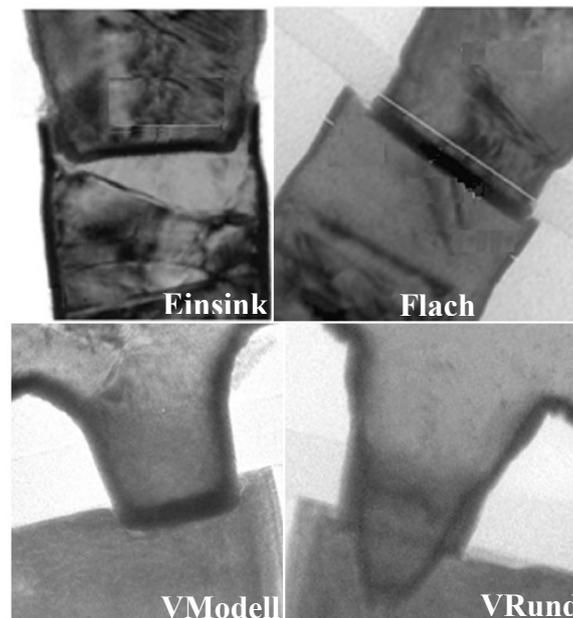


Bild 4.1: TEM-Bild der 4-Via-Modelle [6, 8, 18, 52, 53, 54].

Bei den untersuchten Metallisierungsstrukturen handelt es sich um eine zweilagige Cu-Leitbahn, die mit einer Durchkontaktierung verbunden ist. In der Regel besitzt Cu kubisch

flächenzentrierte Elementarzellen mit unterschiedlicher Ausrichtungsorientierung. Die unterschiedlichen Orientierungen entstehen während der Abscheidung von Cu, bei der die Cu-Keime zu Körnern mit offensichtlichen Korngrenzen führen. Die aufgrund der unterschiedlichen Ausrichtungsorientierungen entstehenden Körner weisen verschiedene E-Moduln auf. Die Effekte der verschiedenen E-Moduln in der Leiterbahn und der unterschiedlichen Aktivierungsenergien in den Korngrenzen sowie dem Interface werden bei der Untersuchung dieser Arbeit jedoch nicht berücksichtigt. Es wird von einem Standard-Cu mit einem E-Modul von 125 GPa ausgegangen.

4.2 Modellierung der Geometrien

Die in dieser Arbeit als das Flachmodell bezeichnete Durchkontaktierung liegt unmittelbar auf der Oberkante der ersten Metallisierung auf. Das Flachmodell besitzt im oberen Bereich der Durchkontaktierung eine Anpassung der Geometrie, welche im englischen auch als Chamfering bezeichnet wird. Von der Geometrie ähnelt das Chamfering einem Ausschenkstutzen eines Messbechers. Mit dieser Abschrägung der Durchkontaktierung wird eine homogenere Stromdichteverteilung erreicht. Die Geometrie des Flachmodells kann aus der Literatur entnommen werden [18]. In Bild 4.2 links ist die Vernetzung des verwendeten Flachmodells dargestellt.

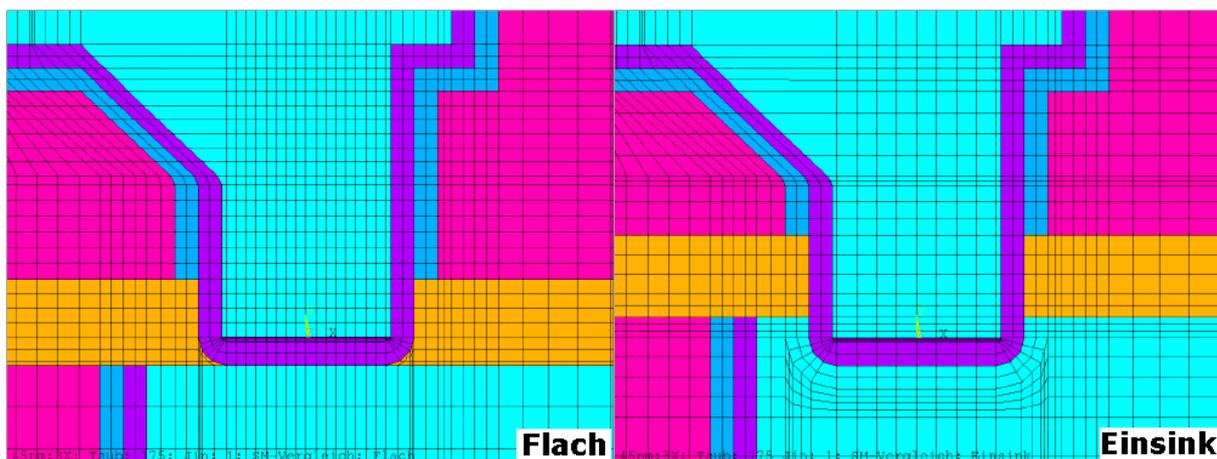


Bild 4.2: Vernetzung des Flach- und Einsinkmodells.

Ein weiteres Modell ist in Bild 4.2 rechts zu erkennen, welches in dieser Arbeit als das Einsinkmodell bezeichnet wird. Das Einsinkmodell besitzt eine ähnliche Geometrie wie das Flachmodell. Die Verankerung ist eine technologische Maßnahme, welche ergriffen wurde, um mehr Materialreserve für eine potentielle Lochbildung in der unteren Metallisierung bereitzustellen und so die Lebensdauer zu verlängern.

Als weitere Modelle wurden das V- und VRundmodell konstruiert. Das V-Modell verfügt über einen flachen verankerten Boden der Durchkontaktierung, jedoch ohne eine Anpassung im oberen Bereich der Durchkontaktierung (Chamfering). Die Durchkontaktierung ist V förmig modelliert. Das VRundmodell hat eine ähnliche Geometrie wie das VModell, jedoch besitzt dieses einen komplett abgerundeten Boden der Durchkontaktierung.

Die V-Geometrie soll einen positiven Einfluss auf die lokale Stressverteilung in der Durchkontaktierung nehmen im Vergleich zu Modellen mit Chamfering. Ferner besitzt Ta einen um ca. den Faktor 90% höheren spezifischen Widerstand und dementsprechend eine niedrigere Wärmeleitfähigkeit im Vergleich mit Cu. Bei dem VRundmodell vergrößert sich der Flächenumfang von Ta am Boden der Durchkontaktierung durch die komplett abgerundete Geometrie. Da der elektrische Widerstand umgekehrt proportional von dem Flächenumfang des betrachteten Materials ist, wird mit diesem Modell eine homogenere Stromdichteverteilung am Boden der Durchkontaktierung erreicht. Dementsprechend ist zu erwarten, dass die Temperaturgradienten sinken und sich das Zuverlässigkeitsverhalten in Bezug auf die Elektromigration verbessert. Die Vernetzungen des V- und VRundmodells sind in Bild 4.3 dargestellt.

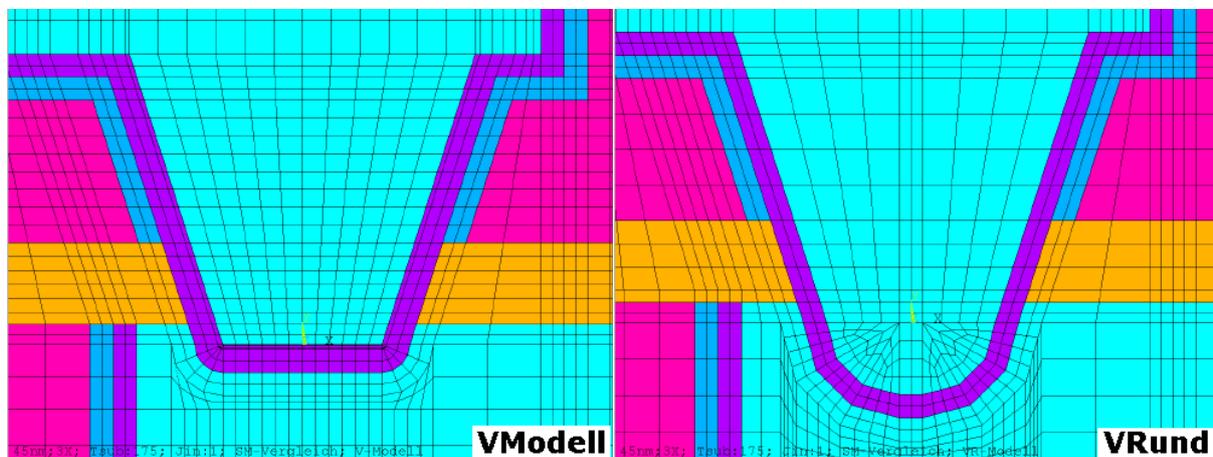


Bild 4.3: Vernetzung des V- und VRundmodells.

4.3 Geometrische Parameter der Viamodelle

Die entstehenden Geometrien wurden anhand von Widerstandsmessungen auf der Leiterbahnen M1 und M2 verifiziert [7]. In Bild 4.4 ist die Widerstandsmessung anhand einer Teststruktur schematisch dargestellt. Gemessen wurde der Widerstand in der M2 zwischen den Vias V1 und V2.

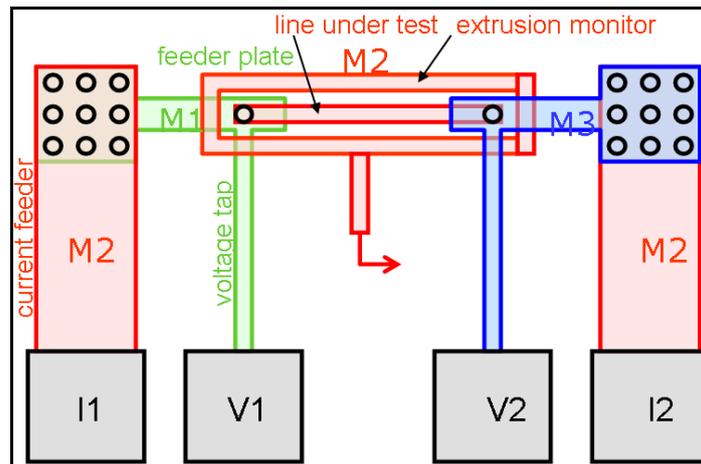


Bild 4.4: Schematische Darstellung der verifizierten Teststruktur [7].

In Bild 4.5 sind die wichtigsten Abmessungen der verankerten Durchkontaktierung in 65nm Technologieknoten anhand einer TEM-Aufnahme veranschaulicht.

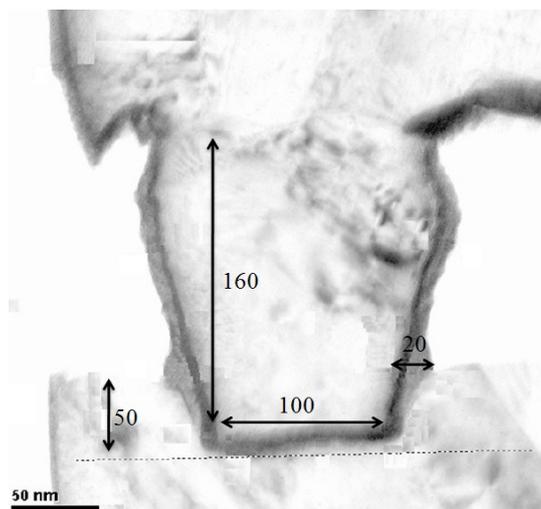


Bild 4.5: Abmessungen [nm] der Durchkontaktierung in 65nm Technologieknoten [7, 8].

An Bild 4.5 erkennt man, dass der Durchmesser der Durchkontaktierung 100nm beträgt. Die Dicke der Diffusionsbarriere ist 20nm. Eine Tiefe der Verankerung von 50nm wurde gewählt und die Durchkontaktierung besitzt eine Höhe von 160nm. Darüber hinaus kann man anhand des Maßstabes die Abmessungen gut erkennen.

4.4 Materialparameter

Die für die Simulation verwendeten Materialeigenschaften wurden der Literatur [20, 21, 41-49] entnommen. Die Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit λ von dem spezifischen

Widerstand ρ der Metallisierung für gut leitende Metalle wird durch das Wiedemann-Franz-Gesetz beschrieben [28, 41]:

$$\lambda = 3 \cdot \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \frac{T}{\rho_0(1 + \alpha_\rho \Delta T)} \quad (50); \text{ mit}$$

k_B : Boltzmannkonstante

e : Elementarladung

T : Temperatur

Die Materialparameter sind temperaturabhängig und sind in der Tabelle 4.1 bei 300K aufgelistet. Die Einheiten werden hier so angegeben, wie sie auch im Simulationsprogramm ANSYS® verwendet werden.

Nr	Mat	Par.\Temp	Bei 300K	Einheit	Nr	Mat	Par.\Temp	Bei 300K	Einheit		
1	Cu	λ	4,01E-04	W/ μ mK	6	Si	Λ	1,48E-04	W/ μ mK		
		ρ	1,74E-02	$\mu\Omega$ m			P	4,40E+06	$\mu\Omega$ m		
		$\alpha\lambda$	-1,25E-04	.-.			Aλ	-3,31E-03	.-.		
		$\alpha\rho$	3,65E-03	.-.			E	1,30E+05	μ Pa		
		E	1,25E+05	μ Pa			N	0,45	.-.		
		v	3,40E-01	.-.			Θ	2,54E-06	1/K		
		θ	1,67E-05	1/K			Aθ	2,01E-03	.-.		
		$\alpha\theta$	3,59E-04	.-.			7	SiCN	Λ	1,10E-06	W/ μ mK
		Do	0,78	cm ² /s					P	1,00E+11	$\mu\Omega$ m
		Z*	-4						E	1,67E+05	μ Pa
No	8,45E+10	1/m ³	N	0,17	.-.						
Ω	1,12E-29	m ³	Θ	1,10E-05	1/K						
Q	0,2168	eV	8	Loch	Λ	1,00E-18			W/ μ mK		
EA	0,9	eV			P	1,00E+18	$\mu\Omega$ m				
2	Ta	λ	5,80E-05	W/ μ mK	9	Dielektr. 1	λ	3,00E-07	W/ μ mK		
		ρ	1,57E-01	$\mu\Omega$ m			ρ	1,00E+18	$\mu\Omega$ m		
		$\alpha\lambda$	8,62E-05	.-.			E	7,00E+04	μ Pa		
		$\alpha\rho$	2,93E-03	.-.			v	0,18	.-.		
		E	1,85E+05	μ Pa			θ	1,70E-05	1/K		
		v	0,33	.-.			10	Dielektr. 2	λ	3,00E-07	W/ μ mK
		θ	6,60E-06	1/K					ρ	1,00E+18	$\mu\Omega$ m
		$\alpha\theta$	1,82E-04	.-.					E	4,30E+03	μ Pa
3	CuSi	λ	2,50E-05	W/ μ mK	v	0,2			.-.		
		ρ	2,69E-01	$\mu\Omega$ m	θ	3,65E-05	1/K				
		$\alpha\rho$	3,32E-03	.-.	11	Dielektr. 3	λ	3,00E-07	W/ μ mK		
		E	1,25E+05	μ Pa			ρ	1,00E+18	$\mu\Omega$ m		
		v	0,34	.-.			E	5,60E+04	μ Pa		
		θ	1,67E-05	1/K			v	0,2	.-.		
$\alpha\theta$	3,59E-04	.-.	θ	1,70E-05			1/K				

4	Ta(N)	λ	5,70E-05	W/ μ mK	12	Dielektr.	4	λ	3,00E-07	W/ μ mK
		ρ	1,80E-01	$\mu\Omega$ m				ρ	1,00E+18	$\mu\Omega$ m
		E	5,50E+05	μ Pa				E	7,00E+03	μ Pa
		v	0,342	.-.-				v	0,2	.-.-
		θ	6,50E-06	1/K				θ	1,70E-05	1/K
5	SiCOH	λ	3,00E-07	W/ μ mK						
		ρ	1,00E+18	$\mu\Omega$ m						
		E	1,55E+04	μ Pa						
		v	0,2	.-.-						
		θ	1,70E-05	1/K						

Tabelle 4.1: Für die Simulationen verwendete Materialparameter bei 300K.

4.5 Randbedingungen für die Simulation

Die Randbedingungen für die Simulation entsprachen den Bedingungen der Elektro- und Stressmigrationstests auf Packagelevel. Die unterschiedlichen Abscheidetemperaturen entsprechen den vorgegebenen Herstellungstemperaturen. In Tabelle 4.2 sind die für die Simulation verwendeten Randbedingungen angegeben.

Nr.	Randbedingungen	Wert	Einheit	Quelle
1	Eingeprägte Stromdichte	0.1;0.75;1.5;3;4	MA/cm ²	6, 7, 8
2	Stromrichtung	e-Fluss downstream	.-.-	6, 8, 25
3	Substrattemperatur	350	°C	6, 7, 8, 25
4	SM-Test	175	°C	10, 14, 25
5	EM-Test	1.5	MA/cm ²	6, 7, 8, 25
6	EM-Test	325	°C	6, 7, 8, 25
6	Abscheidetemp., Cu	mittel	°C	16, 63
7	Abscheidetemp., Ta/Ta(N)	niedrig	°C	16, 63

Tabelle 4.2: Für die Simulationen verwendete Randbedingungen.

5 Simulationsdurchführung

In diesem Kapitel werden die in der vorliegenden Arbeit durchgeführten Simulationen sowie ihre Ergebnisse präsentiert und diskutiert. Die Simulationsdurchführung umfasst die folgenden Punkte:

- Simulation unter Berücksichtigung des Herstellungsprozesses.
- Vergleich der Stressberechnung mit Herstellungsprozess und mit Referenztemperatur.
- Voruntersuchung der Technik der Submodellierung.
- Mechanische Charakterisierung der 4-Via-Modelle.
- Parametereinflüsse auf die Zuverlässigkeitsaspekte.

5.1 Simulation unter Berücksichtigung des Herstellungsprozesses

Die gesamte Simulation des Metallisierungsmodells besteht aus zwei Phasen. Zum einen die thermisch-elektrische Berechnung und zum anderen die thermisch-mechanische Berechnung. Durch Anlegen einer Substrattemperatur, die dem beschleunigten Zuverlässigkeitstest entspricht, wird bei der thermisch-elektrischen Simulation die Temperaturverteilung infolge der joulschen Eigenerwärmung in der Leitbahn berechnet. Diese Temperaturverteilung wird als thermische Randbedingungen in die thermisch-mechanische Berechnung geladen.

Für die mechanische Berechnung bietet das verwendete Simulationsprogramm ANSYS® die Möglichkeit einer sogenannten „Birth and Death“- Berechnung. Mit Hilfe der Befehle für die Entstehung oder Unterdrückung von Elementen können die ausgewählten Elemente virtuell gelöscht oder aber auch hinzugefügt werden. Dabei wird für das jeweilige Element die Steifigkeitsmatrix verändert und die Freiheitsgrade für eine Ausdehnung vorgegeben. Hierdurch bietet sich die Möglichkeit, dass jedem Material eine eigene Abscheide- oder Prozessschritttemperatur vorgegeben wurde. Die Temperaturen entsprachen denen eines Herstellungsprozesses [16, 63].

In aufeinanderfolgenden Schritten wurde die thermisch induzierte Spannung berechnet. Dabei wurde von jedem möglichen Prozessschritt der Vorstress mitberücksichtigt. Der erste Schritt ist die Abscheidung vom SiCOH-Dielektrikum auf dem Si-Substrat. Im zweiten Schritt ist das Dielektrikum bis auf der ersten Ebene geätzt. Im dritten bis zum fünften Schritt werden Ta-

und TaN-Barrierschicht sowie Cu in der ersten Metallisierung abgeschieden. Mit dem letzten Prozessschritt ist dann auch der sogenannte Pre-Stress in der Struktur weitestgehend bestimmt. Es ergeben sich insgesamt 15 Schritte bei dieser thermisch-mechanischen Simulation [16, 63]. Ab dem fünften bis zum fünfzehnten Schritt wird die Simulation in Bild 5.1 dargestellt.

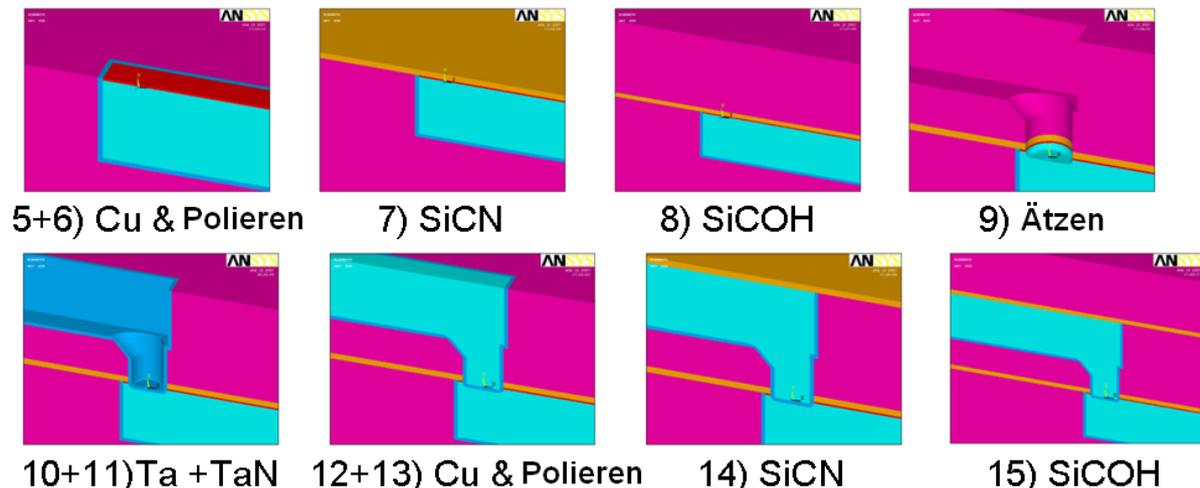


Bild 5.1: Stressberechnung unter Berücksichtigung des Herstellungsprozesses [16].

Beispielhaft werden im nächsten Unterkapitel die Stressergebnisse aus der Berechnung unter Berücksichtigung des Herstellungsprozesses mit denen aus der Berechnungsmethode mit Referenztemperatur verglichen und diskutiert. Für diesen Zweck wurde die Simulation bei einem 65nm Technologieknoten durchgeführt.

5.1.1 Vergleich der Stressberechnung mit Referenztemperatur und EM-Bedingung

Zuerst werden die Stressergebnisse aus der Berechnung mit einer Referenztemperatur (Tref) unter EM-Randbedingung untersucht. Eine Substrattemperatur (T_{sub}) von 325°C und eingeprägte Stromdichte J_{ein} von 1.5 MA/cm² werden als Randbedingung eingegeben. Eine Tref von 250° C wurde für den stressfreien Zustand von Cu gewählt, da das Kupfer bei dieser Temperatur nahezu stressfrei ist. Damit zwischen dem kompressiven und tensilen Stress klar unterschieden werden kann, wird der hydrostatische Stress für die Vergleichsanalyse genommen. In Bild 5.2 ist die hydrostatische Stressverteilung aus der Berechnung mit dem Herstellungsprozess und aus der mit einer Referenztemperatur dargestellt.

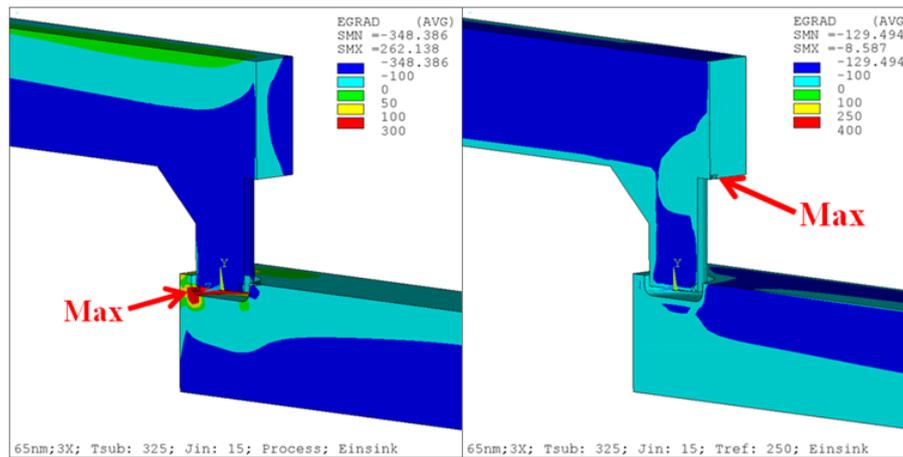


Bild 5.2: Hydrostatischer Stress [MPa] mit Herstellungsprozess (links) und Referenztemperatur (rechts) beim 65nm-Modell, EM-Randbedingung.

Aus der Untersuchung nach einer Stressberechnung mit Berücksichtigung des Herstellungsprozesses befindet sich die Metallisierung in einem überwiegend kompressiven Stresszustand. An einigen für die SM-Lochbildung empfindlichen Stellen, wie z.B. in der Abrundung der Durchkontaktierung der ersten Metallisierung und auf der Oberkante der zweiten Metallisierung [2, 6, 8, 10] kann man tensile Stressbereiche in rot erkennen. In der ersten Metallisierung unterhalb des Bodens der Durchkontaktierung kommt es zu einem tensilen Stressbereich rund um die Durchkontaktierung herum mit einem maximalen hydrostatischen Stress in der Abrundung.

Bei der Stressberechnung mit einer Referenztemperatur hingegen befindet sich die Metallisierung komplett in einem kompressiven Zustand. Der maximale hydrostatische Stress ergibt sich auf der Unterkante der oberen Metallisierung und ist in hell blau zu erkennen. An der Stelle unterhalb des Bodens der Durchkontaktierung erkennt man außerdem keine typischen für die SM-Lochbildung empfindlichen Stressbereiche. In Bild 5.3 sind die Stressgradienten bei den beiden Stressberechnungen dargestellt.

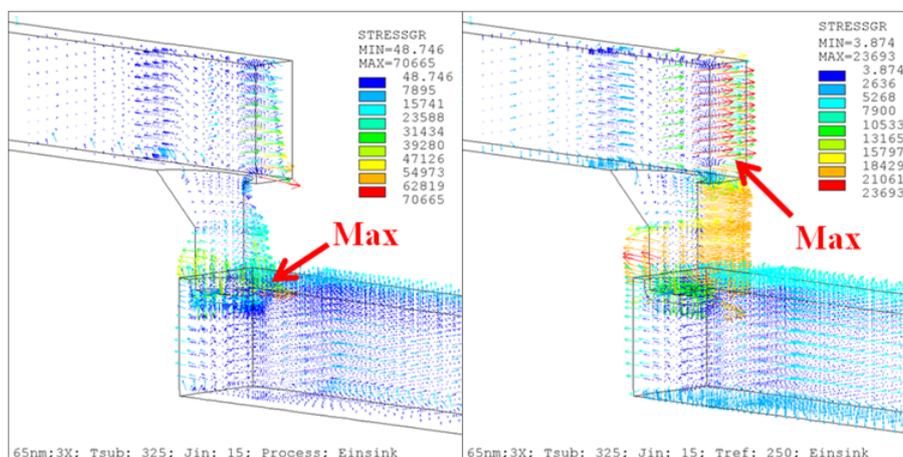


Bild 5.3: Stressgradienten [Pa/μm] mit Herstellungsprozess und Referenztemperatur, EM-Randbedingung.

An Bild 5.3 erkennt man, dass sich die Stressgradienten bei der Berechnung des Pre-Stresses von der Metallisierung aus aufgrund des überwiegend kompressiven Stresszustandes überwiegend nach außen hin richten. Der Betrag der rot und orange markierten Stressgradienten bei der Berechnung mit einer Referenztemperatur stimmt mit dem Betrag bei der Berechnung mit Herstellungsprozess in den jeweiligen Stellen überein, jedoch befinden sich die erhöhten Stressgradienten bei der Berechnung des Pre-Stresses an der für die SM-Lochbildung erwarteten Stelle.

5.1.2 Vergleich der Stressberechnung mit Referenztemperatur und SM-Bedingung

Im Weiteren werden die Ergebnisse der Stressberechnungen unter SM-Randbedingung mit einer Substrattemperatur T_{sub} von 175°C verglichen. Der Stress resultiert ausschließlich aus den Unterschieden der thermischen Ausdehnungskoeffizienten und den E-Moduln. Der Anteil der Stressmigration dominiert die Migrationseffekte in der Metallisierung. In Bild 5.4 ist der hydrostatische Stress für beide Stressberechnungen zum Vergleich dargestellt.

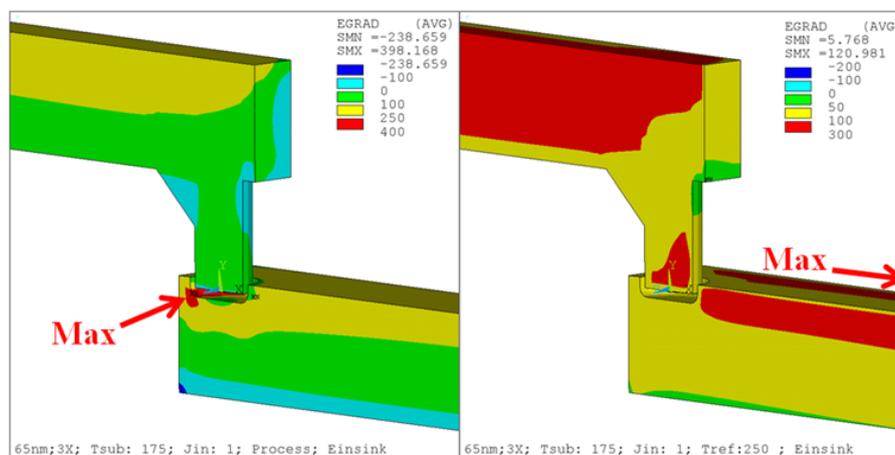


Bild 5.4: Hydrostatischer Stress [MPa] mit Herstellungsprozess (links) und Referenztemperatur (rechts) beim 65nm-Modell, SM-Randbedingung.

Aus Bild 5.4 ist ersichtlich, dass sich die Metallisierung im Falle der SM-Randbedingung bei der Berechnungsmethode mit Berücksichtigung des Herstellungsprozesses in einem überwiegend tensilen Stresszustand befindet. In der Abrundung der Durchkontaktierung der ersten Metallisierung und auf der Oberkante der Leitbahnen kann man wieder für die SM-Lochbildung empfindliche tensile Stressbereiche erkennen. An der Stelle der Abrundung der Durchkontaktierung unterhalb der Diffusionsbarriere tritt der maximale hydrostatische Stress von 398 MPa auf. Dort ist die Lochbildung wie man aus Experimenten weiß auch zu erwarten.

Im Gegensatz hierzu befindet sich die Metallisierung bei der Stressberechnung mit einer Referenztemperatur in einem kompletten tensilen Stresszustand. Die Orte der Maxima tauschen sich im Vergleich zur Berechnung unter EM-Randbedingung. Der maximale Stress von 120 MPa befindet sich auf der Oberkante der unteren Leiterbahn, dieser Wert ist im Vergleich mit der Berücksichtigung des Pre-Stresses um ca. dreimal kleiner. An der Stelle der Abrundung der Durchkontaktierung unterhalb der Diffusionsbarriere kann man keine für die SM-Lochbildung empfindliche Stelle erkennen. In Bild 5.5 ist der Vergleich der Stressgradienten bei beiden Stressberechnungen dargestellt.

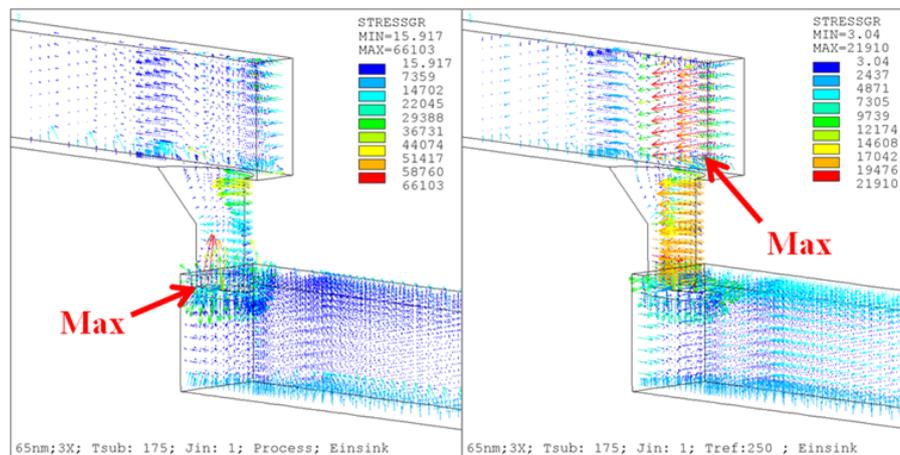


Bild 5.5: Stressgradienten [Pa/μm] mit Herstellungsprozess und Referenztemperatur, SM-Randbedingung.

Am Bild 5.5 erkennt man, dass aufgrund des überwiegend tensilen Stresszustandes die Stressgradienten nach innen gerichtet sind. Analog zu der EM-Bedingung stimmt der Betrag der rot und orange markierten Stressgradienten bei der Berechnung mit Referenztemperatur mit dem Betrag bei der Berechnung des Pre-Stresses in den jeweiligen Stellen überein. Die höchsten Stressgradienten befinden sich bei der Berechnung mit dem Herstellungsprozess ebenfalls in der für die SM-Lochbildung erwarteten Stelle, nämlich im Bereich des Bodens der Durchkontaktierung. Aus der vorangegangenen Untersuchung ist zu entnehmen, dass der Herstellungsprozess in den Simulationen unbedingt mit berücksichtigt werden muss.

5.2 Nutzbarkeit der Technik der Submodellierung

Für die Umsetzung der Lösungsansätze zur Berechnung der Rissbildung und Porosität ist eine Berechnungstechnik notwendig, welche eine lokale und somit genauere Stressanalyse ermöglicht. Mit einer lokalen Analyse ist gemeint, dass man die Komplexität der Stressanalyse, welche von unterschiedlichen temperaturabhängigen Materialparametern der

Metallisierungsstruktur abhängig ist, begrenzen kann. Im Falle der Rissbildung, Lochbildung und Porosität sind die kritischen Stellen aus mehreren Untersuchungen in der Literatur sowie aus der Simulation bekannt. Durch die Abgrenzung des Modells und somit durch das Vorhandensein einer höheren Anzahl von Knoten können für eine Stressberechnung geometrisch kritischen Stellen wie z.B. Ecken und Abrundungen genauer abgebildet werden, um Singularitäten zu vermeiden. Die Technik der Submodellierung kam erstmalig bei der lokalen Stressanalyse am Boden der Durchkontaktierung von ULSI-Metallisierungsstrukturen zum Einsatz. Um die Funktionalität dieser Technik sicherzustellen wurde die Nutzbarkeit anhand eines Modells des 32nm Technologieknotens voruntersucht.

Generell sollte bei der Modellierung der Gesamtstruktur auf die Homogenität und bei der Submodellierung auf die Feinheit der Vernetzung geachtet werden. In Tabelle 5.1 sind die Ergebnisse des maximale Von Mises Stresses VMS und des hydrostatischen Stress HS in der Cu-Leitbahn sowohl vom Gesamtmodell als auch vom Submodell eingetragen.

Modelle	32nm-Gesamt	32nm-Submodell
Tref [°C]	400	400
Tsub [°C]	350	350
Iein [mA]	0.46	0.46
Max. VMS Cu [MPa]	162	163
Max. HS [MPa]	95	119

Tab. 5.1: Tabellarischer Vergleich des Gesamtmodells und des Submodells Modell 32nm.

Im Bereich des Bodens der Durchkontaktierung erreichen sowohl der VMS als auch der hydrostatische Stress hohe Werte. Für beide Modelle wurde eine Übereinstimmung der örtlichen Stressverteilung festgestellt. Die Stressverteilungen sind in Bild 5.6 und 5.7 dargestellt.

Bei der Ermittlung des VMS wurde innerhalb eines Knotens eine Wertabweichung von ca. 0.71 % festgestellt. Der Betrag einer Wertabweichung, der kleiner ist als 5 %, gilt bei einer Stressanalyse also akzeptabel [67] und belegt eine genügende Netzfeinheit des Submodells für die weitere Untersuchung. Bei der hydrostatischen Stressverteilung ergibt sich eine Wertabweichung von ca. 20.94%. Diese Abweichung resultiert mathematisch aus dem Berechnungsschritt des hydrostatischen Stresses, welcher von einem externen Programm in jeweiligen Knoten eines Elementes durchgeführt wird. Der hydrostatische Stress berechnet sich aus dem Mittelwert der Hauptspannungen. Dies führt zu einer Wertabweichung von mehr

als 2% innerhalb eines Knotens und bei einer Knotenanzahl von 8 innerhalb eines Elementes summieren sich die Rechnerfehler auf. Da diese Abweichung offensichtlich ist, weist sie keine Nachteile für die weitere lokale Stressanalyse auf.

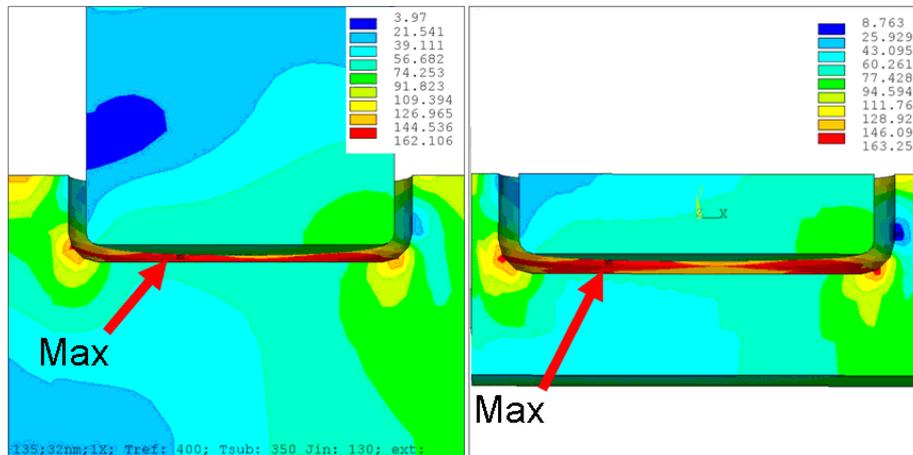


Bild 5.6: Von Mises Stressverteilung [MPa], Gesamtmodell und Submodell [25].

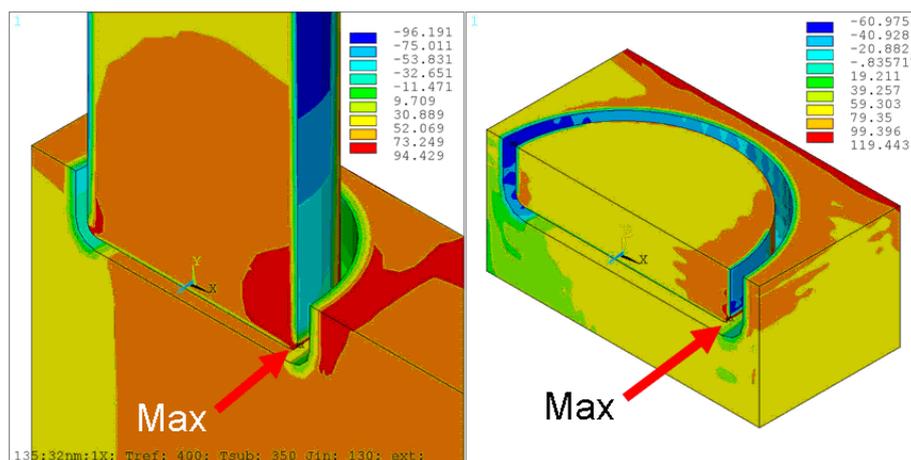


Bild 5.7: Hydrostatische Stressverteilung [MPa], Gesamtmodell und Submodell [25].

Ein Vorteil der Technik der Submodellierung besteht darin, dass auf diese Weise die Stressuntersuchung in einem gewünschten Bereich detailliert durchgeführt werden kann. Außerdem ist es möglich weitere Erkenntnisse über die elastisch sowie plastisch deformierte Barriere zu gewinnen. In Bild 5.6 wurde veranschaulicht, dass die Tantal-Barriere unterhalb der Durchkontaktierung eine deutliche Verspannung und Entspannung erfährt. Das Barrierenmaterial versucht die Spannungen durch eine Materialversetzung abzubauen. Eine Recherche [8, 10] und praktische Untersuchungen [7] führen zu der Aussage, dass in der Barrierschicht aufgrund der Zugfestigkeit von Tantal und Ausdehnung von Kupfer Risse sowie Brüche auftreten.

Zusammenfassend ist festzustellen, dass die Sub-Modelltechnik für die Untersuchung des mechanischen Verhaltens der Barriere sehr gut geeignet ist und die Lösungen im Vergleich zum Gesamtmodell sehr gut übereinstimmen. Abschließend ist anzumerken, dass durch die Verwendung dieser Technik die Implementierung des Simulationsansatzes zur Berechnung der Diffusion in poröser Barriere am Boden der Durchkontaktierung möglich ist.

5.3 Mechanische Charakterisierung der 4-Via-Modelle

In diesem Abschnitt wird der Einfluss mechanischer Materialparameter der Ta/TaN-Barriere untersucht. Um den VMS sowie den hydrostatischen Stress (HS) auszuwerten und so den kritischen Bereich des Bodens der Durchkontaktierung deutlich zu machen wurden Referenzpunkte in der Leiterbahn ausgewählt. Durchgeführt wurde die Untersuchung anhand eines Modells des zu erforschenden 32nm Technologieknotens.

Die Stressverteilung in den 4-Via-Modellen entsprechend der Bedingungen der Elektromigrations(EM)- als auch Stressmigrations(SM)-Tests werden analysiert. Bei EM-Randbedingungen beträgt die eingeprägte Stromdichte 1.5 MA/cm^2 und die Substrattemperatur 325° C . Bei einer SM-Randbedingung beträgt die Substrattemperatur 175° C . Die Analyse der Stressverteilung wurde an den Modellen des aktuellen 45nm Technologieknotens durchgeführt.

In diesem Kapitel werden die Simulationen generell unter Berücksichtigung des Herstellungsprozesses durchgeführt.

5.3.1 Stressuntersuchung mit Referenzpunkten

In der Literatur sind unterschiedliche Werte der E-Moduln von Ta und TaN-Material zu finden. Die unterschiedlichen Werte der E-Moduln sind in der Tabelle 5.2 mit der Literaturquelle eingetragen.

Num.\E-Modul	Ta [GPa]	Quelle	TaN [GPa]	Quelle
1	550	[3, 41]	550	[35]
2	185	[69]	200	[34]

Tab. 5.2: Unterschiedliche E-Moduln von Ta und TaN.

Der Einfluss der unterschiedlichen E-Moduln auf den Stress wurde in diesem Abschnitt am 32nm-Einsinkmodell anhand der Referenzpunkte untersucht. Dazu wurden fünf unterschiedlich positionierte Punkte definiert, in denen der VMS und hydrostatische Stress (HS) ausgewertet wurden, um den Stress in den gewählten Bereichen zu vergleichen. Die Referenzpunkte sind in Bild 5.8 dargestellt.

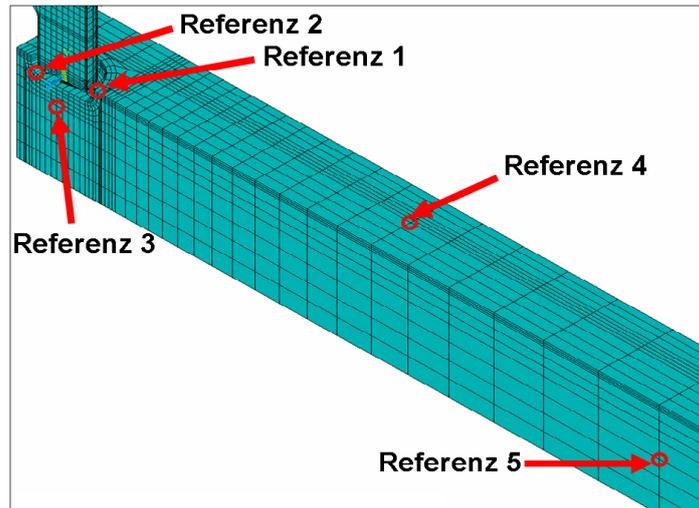


Bild 5.8: Referenzpunkte am 32nm-Einsinkmodell [27].

Der Referenzpunkt 1 ist der Ort, wo der VMS meistens sein Maximum erreicht. Im Referenzpunkt 2 befindet sich meistens das Maximum des hydrostatischen Stresses. Unterhalb der Durchkontaktierung, auf der Oberkante der M1 und am Ende der unteren Metallisierung M1 befinden sich weitere Referenzpunkte. Aufgrund der unterschiedlichen Werte des E-Moduls wurde in dieser Voruntersuchung das E-Modul vom Ta/TaN-Material von 120 bis 550 GPa variiert. In Bild 5.9 ist der VMS-Verlauf bei dieser Variation dargestellt.

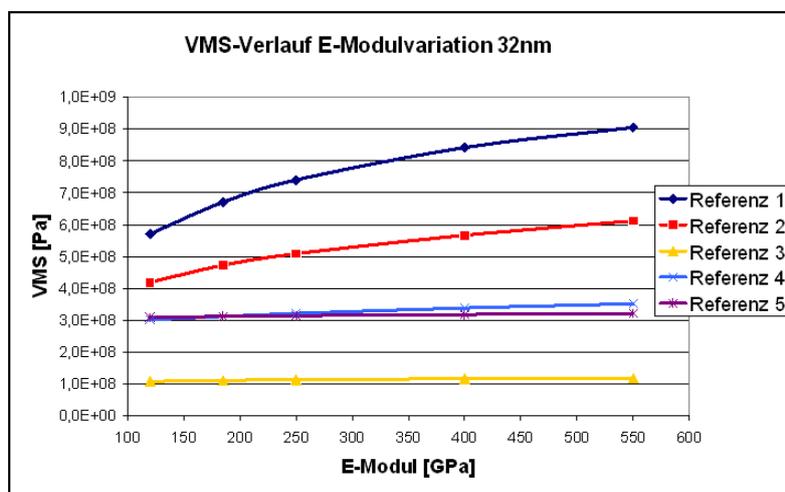


Bild 5.9: VMS-Verlauf bei E-Modulvariation (Ta/TaN) am 32nm-Einsinkmodell [27].

Die Ta/TaN-Barrierschicht hat eine geringere Dicke im Vergleich zur SiCN-Deckschicht. Sie hat jedoch das höchste E-Modul in der untersuchten Struktur. So macht sich der Einfluss des E-Moduls der Barriere in der Metallisierung stark bemerkbar, s. Bild 5.9. Der VMS nimmt mit steigendem E-Modul von Ta/TaN in allen Referenzpunkten (RP) zu. Vor allem steigt der VMS im kritischen Durchkontaktierungsbereich bzw. RP1 und RP2 deutlich an, da die meisten Schubspannungen in diesem Bereich durch die eingesunkene Durchkontaktierung entstehen. Hinzu kommt ein Unterdrückungseffekt der Ausdehnung durch die steifere SiCN-Schicht sowie ebenfalls durch die Ta/TaN-Barriere. Den höchsten VMS von 905 MPa erreicht das Modell mit einem E-Modul von 550 GPa im RP 1. Im RP 1 beträgt das Zunahmeverhältnis dieses Modells ca. 36.9 % im Vergleich zum 120 GPa E-Modul, 25.8 % zum 185 GPa E-Modul, 18.2 % zum 250 GPa E-Modul und 6.9 % zum 400 GPa E-Modul. In Bild 5.10 ist der hydrostatische Stress in allen Referenzpunkten bei unterschiedlichen E-Moduln dargestellt.

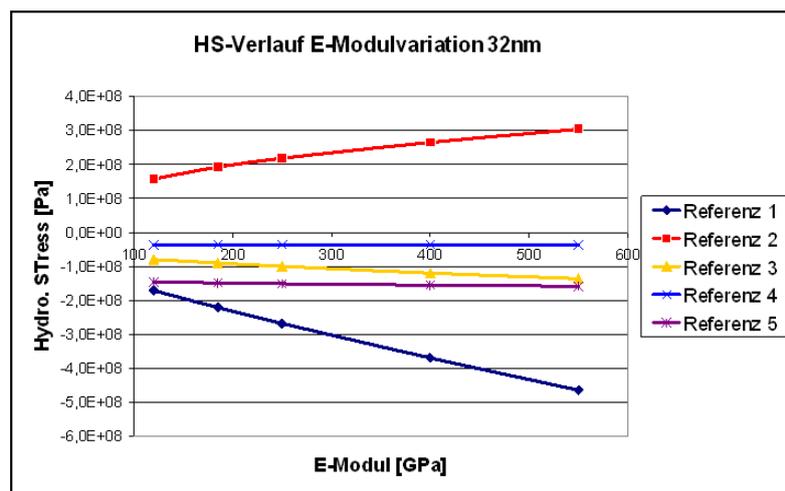


Bild 5.10: HS-Verlauf bei E-Modulvariation (Ta/TaN) am 32nm-Einsinkmodell [27].

Am Bild 5.10 erkennt man, dass im RP 2 der tensile HS wie beim VMS mit steigendem E-Modul deutlich zunimmt. In allen anderen RP erkennt man ebenfalls diese Zunahme und im RP 1 ist die Zunahme noch stärker ausgeprägt als im RP 2, jedoch tritt dieser im kompressiven Stressbereich auf. Der HS ist somit weitgehend proportional zum E-Modul der Ta-Barriere. Die untere Metallisierung steht unter kompressivem Stress, welcher für die Beständigkeit gegen Stressmigration vorteilhaft scheint.

Mit zunehmendem E-Modul steigen der VMS und der hydrostatische Stress (HS) an. Der Einfluss der E-Modulvariation bei dem 32nm-Modell ist stärker auf den HS ausgeprägt als auf den VMS. Das höchste HS-Zunahmeverhältnis beträgt 63.2% während das höchste VMS-Zunahmeverhältnis 36.9% ist.

Der höchste tensile HS von 304 MPa erzielte das Modell im RP 2, bei dem ein E-Modul von 550 GPa verwendet wurde. In diesem Punkt beträgt die Zunahme des HS dieses Modells ca. 48.2 % bei einem E- Modul von 120 GPa. Es beträgt 36.8 % bei einem E-Modul von 185 GPa und 28.2 % bei einem E-Modul von 250 GPa sowie 12.2 % mit dem 400 GPa E-Modul. Weiter tritt im RP1 der höchste kompressive HS auf. Er beträgt -464 MPa. In diesem RP 1 beträgt die HS-Zunahme ca. 63.2 % im Vergleich mit dem 120 GPa E-Modul, 52.4 % mit dem 185 GPa E-Modul, 43.2 % mit dem 250 GPa E-Modul und 20.48 % mit dem 400 GPa E-Modul.

Zur Veranschaulichung ist die Auswertung der Ergebnisse in RP 1, 2 und 3 in der Tabelle 5.3 dargestellt.

RP	E-Modul [GPa]	VMS [MPa]	(+) HS [MPa]	(-) HS [MPa]
1	550	905	---	464
1	400	842	---	369
1	250	740	---	268
1	185	671	---	221
1	120	571	---	171
2	550	612	304	---
2	400	567	265	---
2	250	509	218	---
2	185	473	192	---
2	120	419	157	---
3	550	118	---	136
3	400	117	---	119
3	250	114	---	100
3	185	112	---	90
3	120	109	---	79

Tab. 5.3: Auswertung des VMS und HS bei E-Modulvariation (Ta/TaN) am 32nm-Einsinkmodell.

Zusammenfassend stellt man fest, dass signifikante Änderungen der Stresswerte nur in den Referenzpunkten 1 bis 3 vorhanden sind. Dies führt zu der Aussage, dass sich der Stress im Wesentlichen im Bereich des Bodens der Durchkontaktierung entwickelt. Daher besteht die Notwendigkeit den Stress in diesem Bereich zu reduzieren. Außerdem haben die Ausformungen des Bodens der Durchkontaktierung einen erheblichen Einfluss auf die Stressentwicklung.

5.3.2 VMS und hydrostatische Stressverteilung unter EM-Randbedingung

In Bild 5.11 ist die VMS-Verteilung in der Metallisierung dargestellt. Man stellt fest, dass die Durchkontaktierungsformen einen starken Einfluss auf den VMS in der Leiterbahn nimmt.

Der höchste VMS entsteht stets im angrenzenden Bereich zwischen der Ta-Barriere, der Cu-Metallisierung und der SiCN-Deckschicht. Der maximale VMS tritt bei allen Durchkontaktierungsformen mit eingesunkenem Bereich in der Abrundung der Durchkontaktierung unterhalb des Bodens der Durchkontaktierung auf. Die VMS-Entwicklung in der Metallisierung wird durch die Veränderungen gegenüber dem Einsinkmodell besser, welches einen maximalen VMS von 773 MPa aufweist. Im Vergleich zu den anderen Modellen führt die Flachform zur größten Verbesserung im Hinblick auf die VMS-Entwicklung und -Verteilung. In dem Flachmodell wurde ein maximaler VMS von 437 MPa induziert. Er tritt in der Ecke der ersten Metallisierung auf und damit nicht mehr im Bereich des Bodens der Durchkontaktierung.

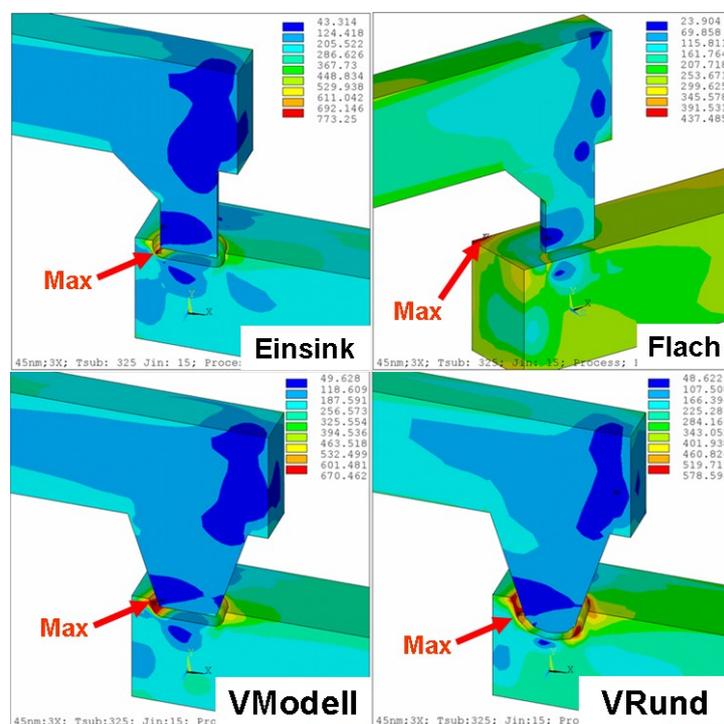


Bild 5.11: Von Mises Stress von Cu [MPa] in den unterschiedlichen Durchkontaktierungsformen bei 325° C [27].

Weiter erkennt man am Bild 5.11, dass das Flachmodell die höchste VMS-Reduktion von 43,4 % im Vergleich mit dem Einsinkmodell, 34,3 % mit dem VModell und 24,3 % mit dem VRundmodell erzielte.

In Bild 5.12 ist die hydrostatische Stressverteilung (HS) in den unterschiedlichen Durchkontaktierungsformen dargestellt. Der HS ist ein Maß der Volumenänderung und zugleich ein maßgebender Faktor für das Zuverlässigkeitsverhalten in Bezug auf die Stressmigration, da meistens Bereiche mit einem tensilen Stresszustand anfällig für die Lochbildung durch Stressmigration sind.

Bei allen Durchkontaktierungsformen liegt das tensile HS-Maximum in der Abrundung der Durchkontaktierung unterhalb des Bodens der Durchkontaktierung. Bei dem VRundmodell tritt der maximale tensile HS auf der Oberkante der ersten Metallisierung auf. Im VRundmodell wurde der geringste HS festgestellt. In Bezug zur Stressmigration wird der Boden der Durchkontaktierung weiter ein kritischer Bereich sein. In der Durchkontaktierung selbst stellt sich überwiegend ein kompressiver HS ein. Bei dem V- und VRundmodell tritt der höchste Anteil des kompressiven Stresses in der Durchkontaktierung auf.

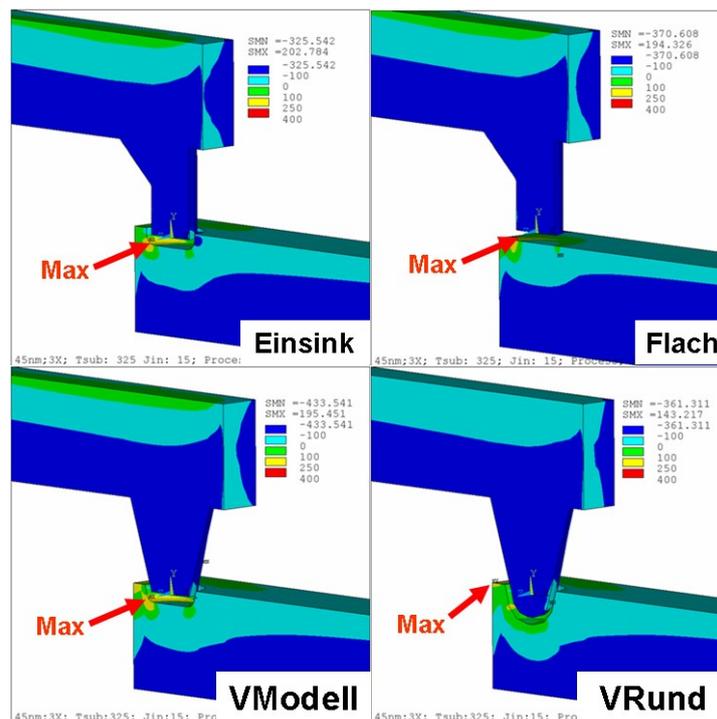


Bild 5.12: Hydrostatischer Stress [MPa] in den unterschiedlichen Durchkontaktierungsformen bei 325° C [27].

Am Bild 5.12 erkennt man, dass das VRundmodell die höchste HS-Reduktion von 29.2 % im Vergleich mit dem Einsinkmodell, 26.6 % mit dem VModell und 26.2 % mit dem Flachmodell erzielt. Somit stellt sich das Flachmodell in Bezug auf den VMS als die günstigste Variante dar. Hinsichtlich des hydrostatischen Stresses (HS) erwies sich das VRundmodell als die günstigste Variante.

5.3.3 Hydrostatischer Stress und Stressgradienten unter SM-Randbedingung

Im Weiteren wurden die Modelle unter der Belastungstemperatur aus dem Stressmigrationstest untersucht. Um einen Überblick über den Einfluss der unterschiedlichen Ausdehnungskoeffizienten auf die Stressverteilung in der unterschiedlichen Durchkontaktierungsgeometrie zu erhalten, wurden die Modelle mit einem modifizierten Netz

versehen, welches eine möglichst homogene Aufteilung insbesondere im Bereich der Durchkontaktierung aufweist. In Bild 5.13 wird die Verteilung des hydrostatischen Stresses in den 4-Via-Modellen veranschaulicht.

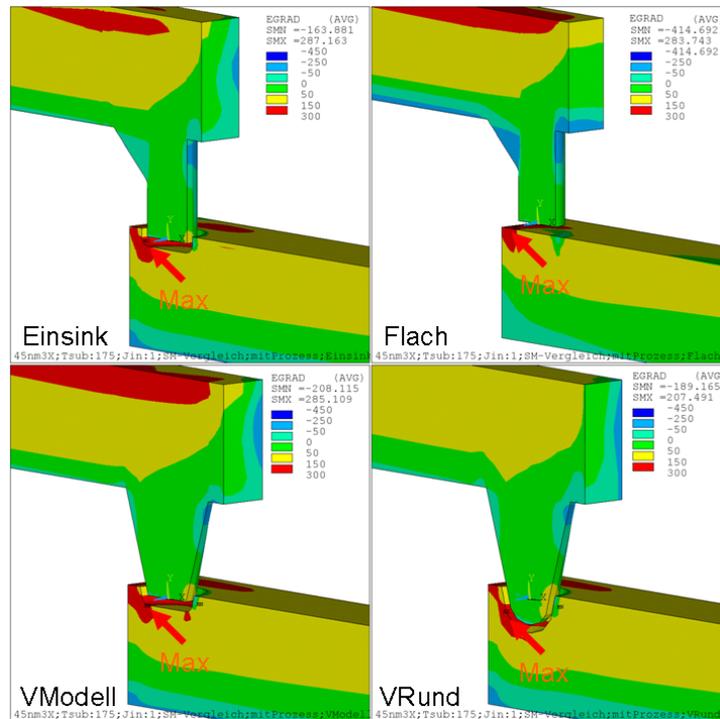


Bild 5.13: Hydrostatischer Stress [MPa] in den 4-Via-Modellen bei 175° C [27].

Aus dem Bild 5.13 ist ersichtlich, dass der maximale hydrostatische Stress (HS) stets am Boden der Durchkontaktierung in der unteren Metallisierung auftritt. An dieser Stelle würde sich entsprechend die maximale Volumenänderung ergeben. An dem positiven Vorzeichen erkennt man, dass der Stress tensil ist, die Metallisierung zieht sich hier also zusammen. Man erkennt weiterhin hohe Werte des HS im angrenzenden Bereich zwischen der Cu-Metallisierung und der SiCN-Deckschicht, wie es bei dem Flachmodell und in der oberen Metallisierung der Fall ist.

Betrachtet man die Geometrie der Durchkontaktierung genauer, stellt man bei dem Einsink- und Flachmodell eine unregelmäßige HS-Verteilung unterhalb der oberen Metallisierung fest. Diese Unregelmäßigkeit kann zu erhöhten Stressgradienten in der Durchkontaktierung beitragen. Im Gegensatz hierzu verteilt sich der HS in dem V- und VRundmodell bis auf den kleinen Bereich unterhalb der oberen Metallisierung homogener, deshalb weisen das V- und VRundmodell in dieser Hinsicht Vorteile auf. Außerdem ist der tensile HS im VRundmodell am geringsten im Vergleich zu anderen Modellen. Das VRundmodell erzielte die höchste HS-Reduktion von 27,7 % im Vergleich mit dem Einsinkmodell, 26,9 % mit dem Flachmodell

und 27 % mit dem VModell. Zusammenfassend ist festzustellen, dass der geometrische Modellierungsansatz bei dem V- und VRundmodell Vorteile hinsichtlich der hydrostatischen Stressverteilung in der Metallisierung mit sich bringt.

In Bild 5.14 ist die Stressgradientenverteilung in den 4-Via-Modellen dargestellt. Die Stressgradienten sind eine wesentliche Ursache für die Stressmigration.

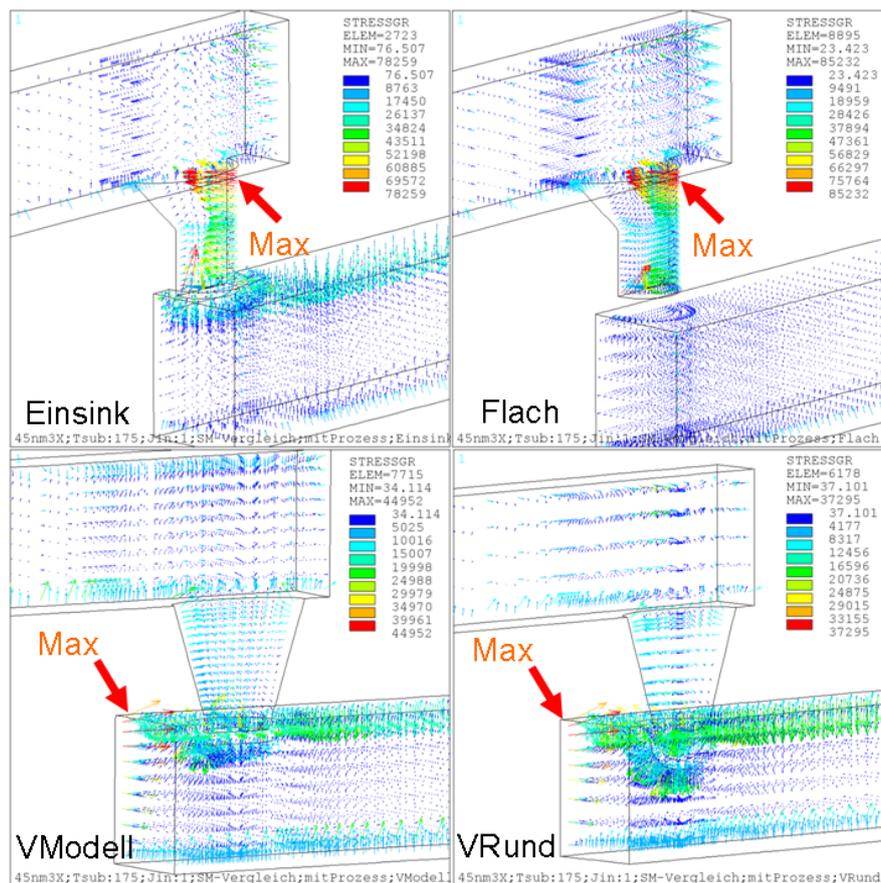


Bild 5.14: Stressgradienten [Pa/ μm] in den 4-Via-Modellen bei 175° C [27].

Am Bild 5.14 ist zu erkennen, dass bei dem Einsink- und Flachmodell die Durchkontaktierung unterhalb der oberen Metallisierung geometrisch bedingt hohe Stressgradienten erfährt. Die Stressgradientenverteilung ist in der Durchkontaktierung nicht homogen und die dort auftretenden erhöhten Werte sind auf hohen Unterschied des hydrostatischen Stresses, in Bild 5.13 dargestellt, zurückzuführen. Die Stressverteilung wird in der Durchkontaktierung durch die V-Geometrie gleichmäßiger. Der Betrag der Stressgradienten in der Durchkontaktierung sinkt um mehr als 80%. Entsprechend wandert der Ort der maximalen Stressgradienten von der Durchkontaktierung in die untere Metallisierung.

Zusammenfassend lässt sich bei der Betrachtung der Stressgradienten feststellen, dass alles für eine Verbesserung durch die V-Geometrie spricht. Die Stressgradienten sind im VRundmodell am kleinsten.

Durch den niedrigeren hydrostatischen Stress und die Stressgradienten würde sich die atomare Bewegung der entstehenden Löcher reduzieren, welche in Richtung des tensilen Stress durch die Stressgradienten getrieben werden. Durch die komplett abgerundete Geometrie vergrößert sich der Flächenumfang von Ta am Boden der Durchkontaktierung. Da der elektrische Widerstand umgekehrt proportional abhängig von dem Flächenumfang des betrachteten Materials ist, reduzieren sich dadurch die Stromdichte sowie die Temperaturgradienten am Boden der Durchkontaktierung und sind homogener verteilt. Das Zuverlässigkeitsverhalten verbessert sich somit in Bezug auf die Elektromigration. Den Verbesserungseffekt durch dieselbe Bodendimensionierung kann man ebenfalls bei größeren Metallisierungsstrukturen der 65- und 90 nm Technologieknoten wiederfinden, dies ist durch die weniger Schnellausfälle sowohl nach EM- als auch SM-Tests bestätigt worden [8, 9].

5.4 Parametereinflüsse auf die Zuverlässigkeit der Metallisierungsstruktur

In diesem Kapitel wurden umfangreiche Simulationen bei den 4-Via-Modellen durchgeführt, um den Einfluss unterschiedlicher Geometrie- und Materialparameter auf das entsprechende Zuverlässigkeitsverhalten festzustellen. Die Randbedingung wurde entsprechend der EM- und SM-Tests gewählt. Die untersuchten Parametereinflüsse lauten wie folgt:

- Barrierenschichtdicke 10-14.4-16.4 bei 32nm und 16-20-22 bei 45nm.
- Deckschichtdicke 20-25-30 bei 32nm und 30-35-40 bei 45nm.
- Unterschiedliche Dielektrika.

Bei der Auswertung der Ergebnisse werden die lokalen Verhältnisse in den Referenzpunkten genauer betrachtet. In Bild 5.15 sind die Referenzpunkte noch einmal bildlich dargestellt.

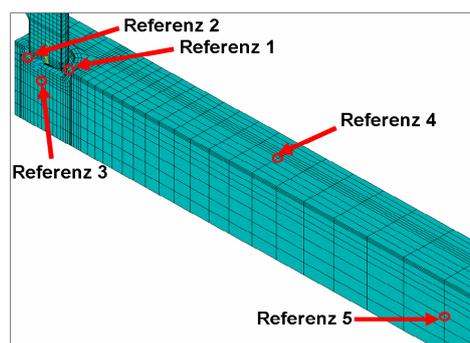


Bild 5.15: Referenzpunkte in der Cu-Metallisierung [27].

In Bild 5.16 werden das 32nm- und 45nm-Einsinkmodell gegenübergestellt, um den Skalierungseffekt noch einmal zu verdeutlichen. Bei der Vorgabe der eingepprägten Stromdichte bleibt diese unverändert in der kleiner werdenden Struktur. Inwieweit die Skalierung die betrachteten Zuverlässigkeitsaspekte beeinflusst wird in diesem Kapitel auch untersucht.

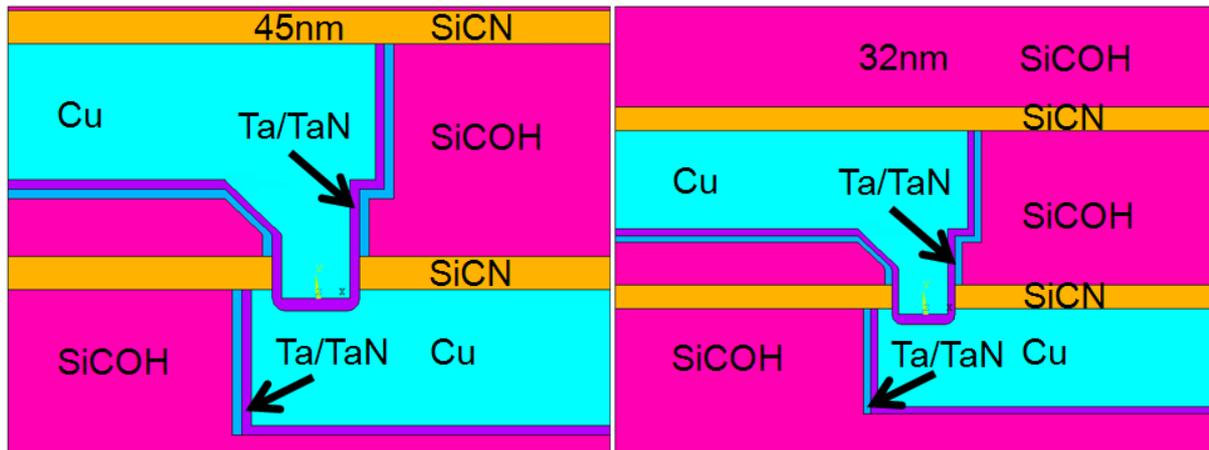


Bild 5.16: 32nm- und 45nm-Einsinkmodell.

5.4.1 Einfluss unterschiedlicher Barrierenschichtdicke

Für die Auswertung des Zuverlässigkeitsaspektes in Bezug auf die Elektro- und Stressmigration wird der Wert der Massenflüsse in der Cu-Metallisierung herangezogen, welche die Anzahl der sich bewegende Atome durch eine spezifische Materialfläche beschreiben. Dieser Wert wird in diesem Kapitel stets in [a.u.] angegeben, damit man zwischen den Ergebnissen eine qualitative Aussage der Auswertung treffen kann. Um den Einfluss unterschiedlicher Barrierenschichtdicken auf die Zuverlässigkeit der Strukturen zu untersuchen, wird am Einsink- und V-Modell die Dicke der Barrierenschicht am Boden der Durchkontaktierung variiert. Für den 32nm Technologieknoten beträgt die Barrierenschichtdicke 10, 14.4 und 16.4 nm. Beim 45nm Technologieknoten beträgt die Barrierenschichtdicke 16, 20 und 22 nm.

5.4.1.1 Einfluss unterschiedlicher Barrierenschichtdicken auf den Massenfluss durch Elektromigration

Einsinkmodell

Das Bild 8.5 zeigt den im Einsinkmodell ermittelten Massenfluss an drei Referenzpunkten („Ref.1-3“) und den max. Massenfluss („Max“). Die beiden ersten Referenzpunkte befinden

sich an der rechten und linken Außenkante der Durchkontaktierung, der dritte Referenzpunkt liegt unter dem Boden der Durchkontaktierung. Da die Leitfähigkeit von Tantal geringer ist als die von Kupfer wird die Feldverteilung durch den größeren Spannungsabfall am Boden der Durchkontaktierung bei ansteigender Barrierendicke homogenisiert. In Folge dessen reduziert eine Änderung die Barrierenschichtdicke von 10nm auf 16,4nm den max. Massenfluss um 9,8%. Die Änderung des Massenflusses am ersten Referenzpunkt liegt sogar bei 30%. Der Massenfluss am zweiten und dritten Referenzpunkt sind deutlich kleiner als der max. Massenfluss und sein Wert bleibt bei veränderter Barrierenschichtdicke nahezu gleich. Da unabhängig von den Leitbahnabmessungen eine Stromdichte von $1,5\text{MA}/\text{cm}^2$ vorgegeben wurde und die Eigenerwärmung nahezu gleich bleibt sind auch der Massenfluss bei 32nm und 45nm ähnlich groß (Bild 5.17 und 5.18).

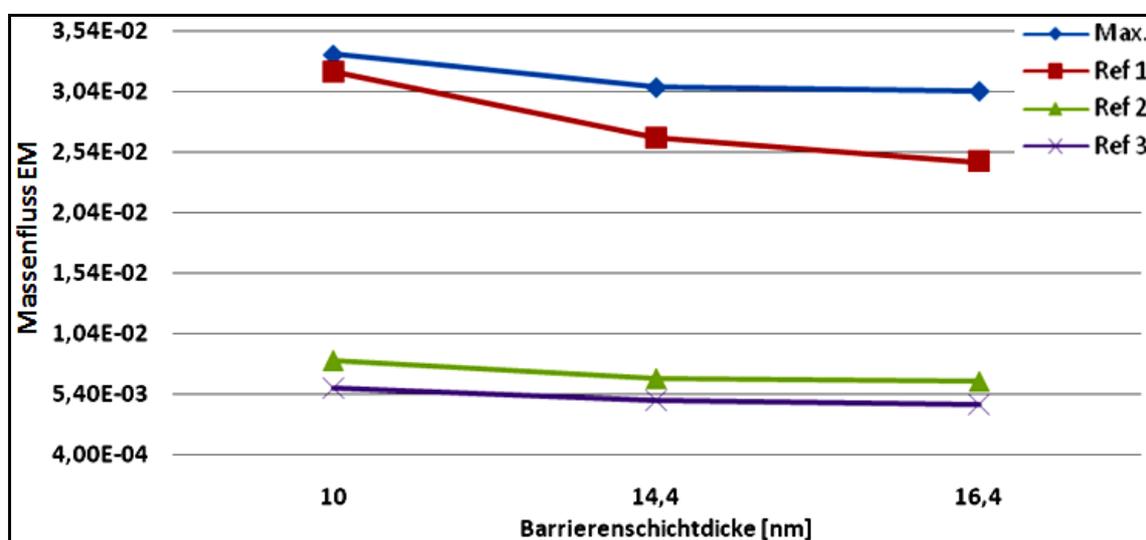


Bild 5.17: Massenfluss durch Elektromigration im Einsinkmodell (32nm) bei unterschiedlichen Barrierenschichtdicken.

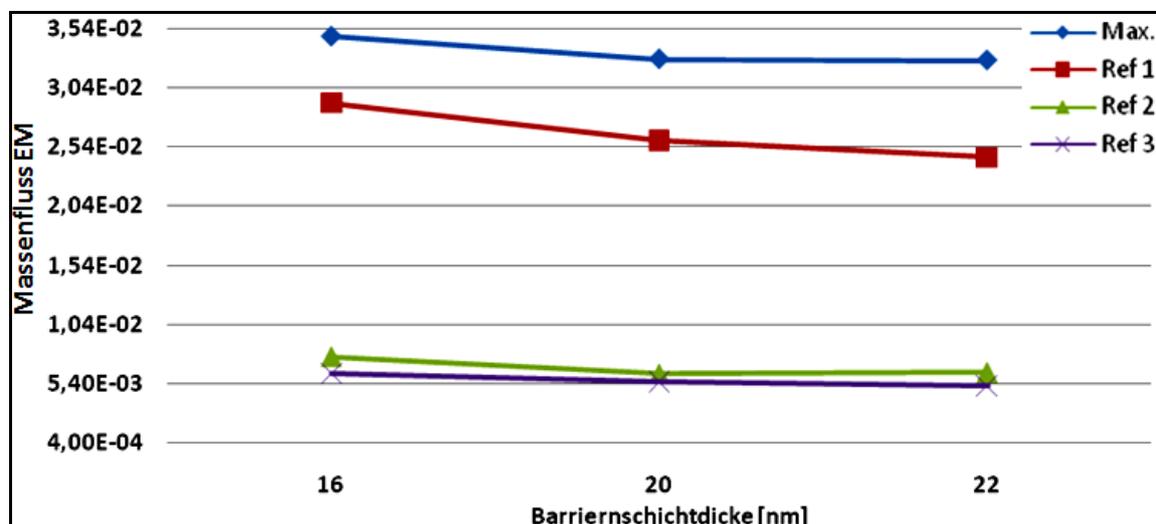


Bild 5.18: Massenflussdichte durch Elektromigration im Einsinkmodell (45nm) bei unterschiedlichen Barrierenschichtdicken.

V-Modell

Neben der Wahl der zu untersuchenden Referenzpunkte und der Barrierenschichtdicke beeinflusst auch die Geometrie der Durchkontaktierung die Ergebnisse. Es wird daher neben dem Einsink auch das V-Modell untersucht (Bild 5.19). Die gewählte Barrierenschichtdicke ist mit den Abmessungen für das 32nm und 45nm Einsinkmodell identisch. Die Referenzpunkte zwei und drei weisen auch im V-Modell geringe Werte auf. Sowohl beim Einsink als auch beim V-Modell führt eine dickere Barrierenschicht zu einem reduzierten Massenfluss durch Elektromigration. Jedoch sind die max. Massenflüsse im V-Modell insgesamt um ungefähr 10% kleiner als im Einsinkmodell. Ein größerer Unterschied zwischen V- und Einsinkmodell zeigt sich am Referenzpunkt eins, dort ist der Massenfluss im V-Modell um den Faktor 2,5 reduziert. Ähnlich wie beim Einsinkmodell bleiben auch beim V-Modell die Massenflüsse bei einem Wechsel vom 32nm zum 45nm Technologieknoten nahezu unverändert.

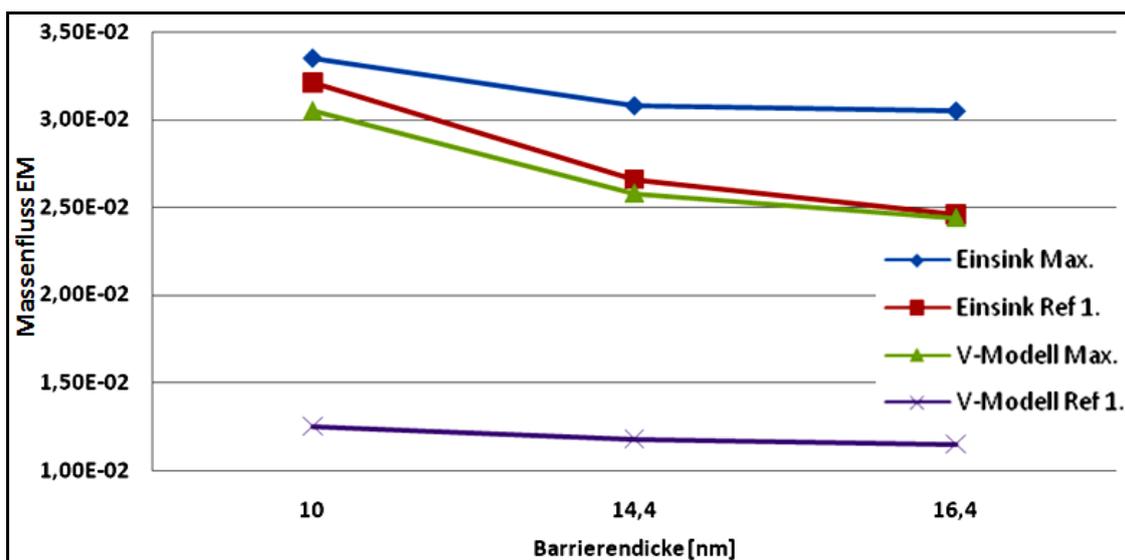


Bild 5.19: Massenfluss durch Elektromigration im Einsink und im V-Modell (32nm) bei unterschiedlichen Barrierenschichtdicke.

5.4.1.2 Einfluss unterschiedlicher Barrierenschichtdicke auf den Massenfluss durch Stressmigration

Einsinkmodell

Neben der Lochbildung durch Elektromigration beeinflusst auch die Stressmigration die Zuverlässigkeit der Kontaktstellen zur Durchkontaktierung. Es ist daher notwendig den Einfluss der Barrierenschichtdicke auf die Stressmigration zu untersuchen. Die gewählten Schichtdicken der Barrieren und die Modellabmessungen sind mit denen der EM-

Untersuchung identisch, jedoch wurde eine Substrattemperatur von 175°C vorgegeben. Das Bild 5.20 zeigt die Entwicklung der Massenflüsse durch Stressmigration im 32nm Einsinkmodell bei unterschiedlichen Barrierenschichtdicken. Eine größere Barrierenschichtdicke führt zu einer homogeneren Stressverteilung, welche kleinere Stressgradienten und einen reduzierten Massenfluss durch Stressmigration zur Folge hat. Bei einer Vergrößerung der Barrierenschichtdicke von 10nm auf 16,4nm sinkt die max. Massenflüsse durch Stressmigration um 27%. Der Massenfluss am zweiten Referenzpunkt sinkt um den Faktor 2,34. Der Massenfluss am dritten Referenzpunkt unter dem Boden der Durchkontaktierung ist hingegen deutlich kleiner als die max. Massenflüsse und bleibt nahezu gleich.

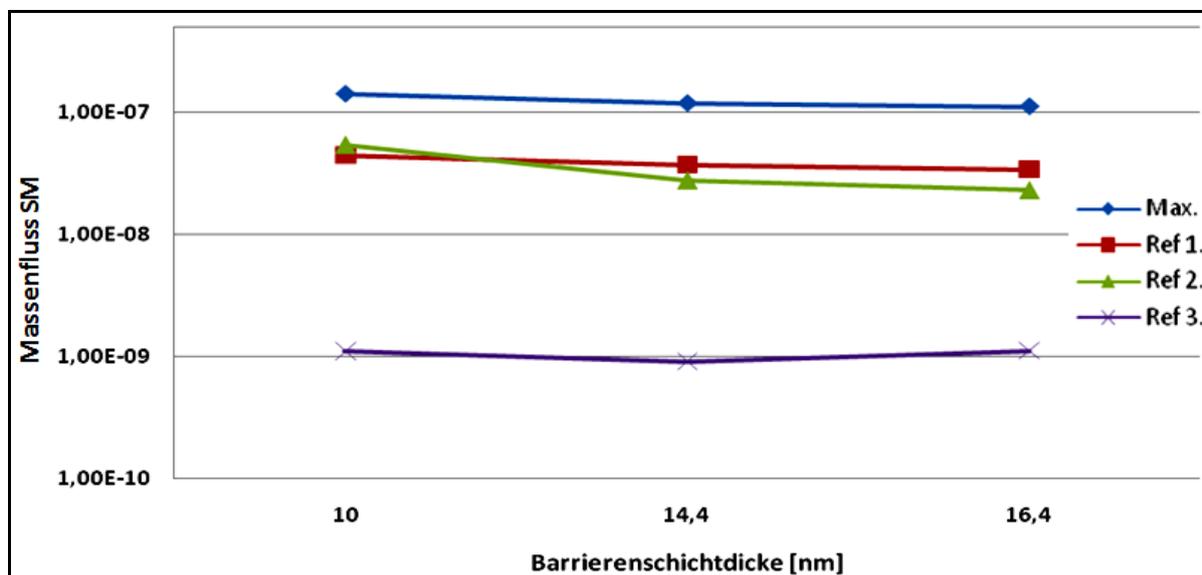


Bild 5.20: Massenfluss durch Stressmigration im Einsinkmodell (32nm) bei unterschiedlichen Barrierenschichtdicken.

Das Bild 5.20 zeigt die Entwicklung der Massenflüsse durch Stressmigration im 45nm Einsinkmodell. Im Vergleich zum 32nm Technologieknoten ist der Massenfluss durch Stressmigration um ungefähr 40% reduziert, auch der Trend zu einem geringeren Massenfluss bei größeren Barrierenschichtdicken bleibt in abgeschwächter Form erhalten. So sinkt der max. Massenfluss bei einer Änderung der Barrierendicke von 16nm auf 22nm um 18% während der Massenfluss am zweiten Referenzpunkt um 74% reduziert wird.

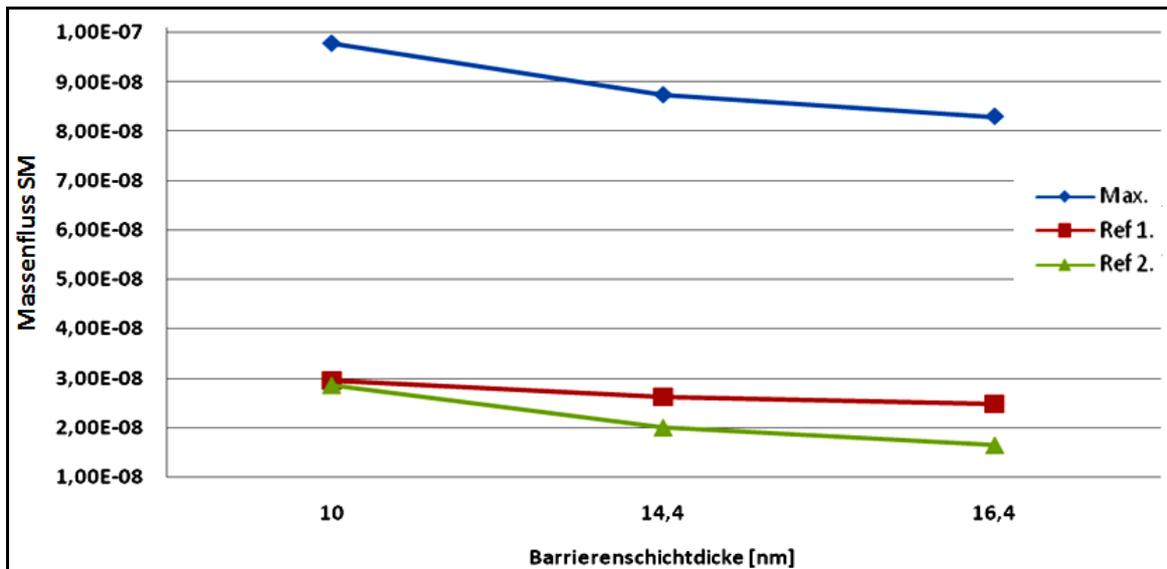


Bild 5.21: Massenfluss durch Stressmigration im Einsinkmodell (45nm) bei unterschiedlichen Barrierschichtdicken.

V-Modell

Auch bei der Stressmigration ist die Form der Durchkontaktierung als Einflussgröße zu berücksichtigen. Zu diesem Zweck wurde neben dem Einsink auch das V-Modell untersucht (Bild 5.22). Die gewählten Randbedingungen und Barriertdicken sind dabei mit den Werten für das Einsinkmodell identisch. Im Vergleich zum Einsinkmodell sind die max. Massenflüsse im V-Modell um ungefähr um 48% kleiner. Der Massenfluss am zweiten Referenzpunkt ist hingegen bei beiden Modellen nahezu identisch.

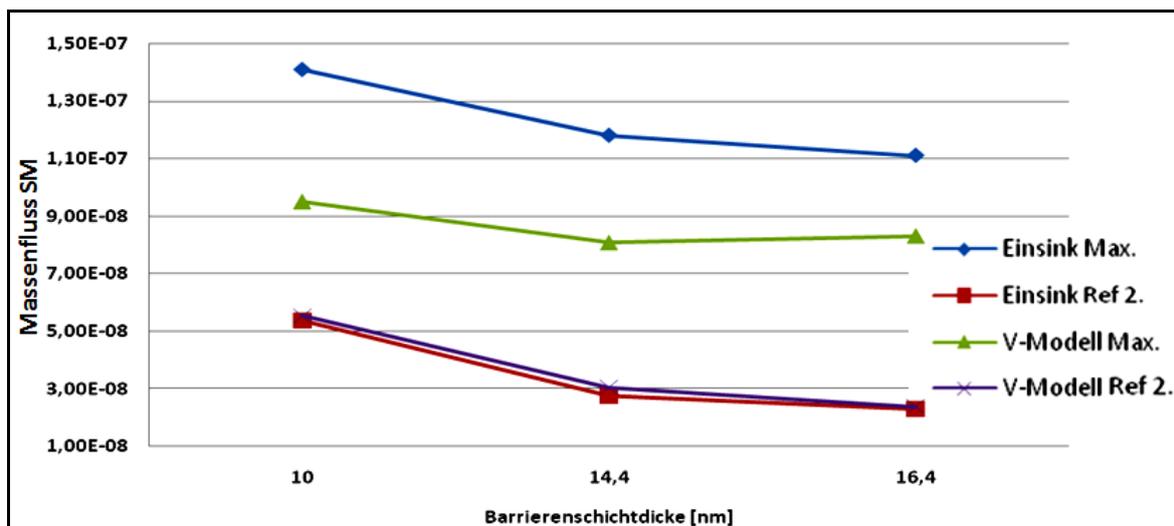


Bild 5.22: Massenfluss durch Stressmigration im Einsink und im V-Modell (32nm) bei unterschiedlichen Barrierschichtdicken.

Die im Vergleich zum Einsinkmodell reduzierten Massenflüsse beim V-Modell bleiben auch bei der 45nm Technologie erhalten, so sind die max. Massenflüsse im V-Modell auch bei

einer Technologiegröße von 45nm um 33% kleiner als beim Einsinkmodell. Der Massenfluss am zweiten Referenzpunkt ist beim V- und Einsinkmodell ähnlich, im Vergleich zur 32nm Technologie ist er jedoch um 87% kleiner.

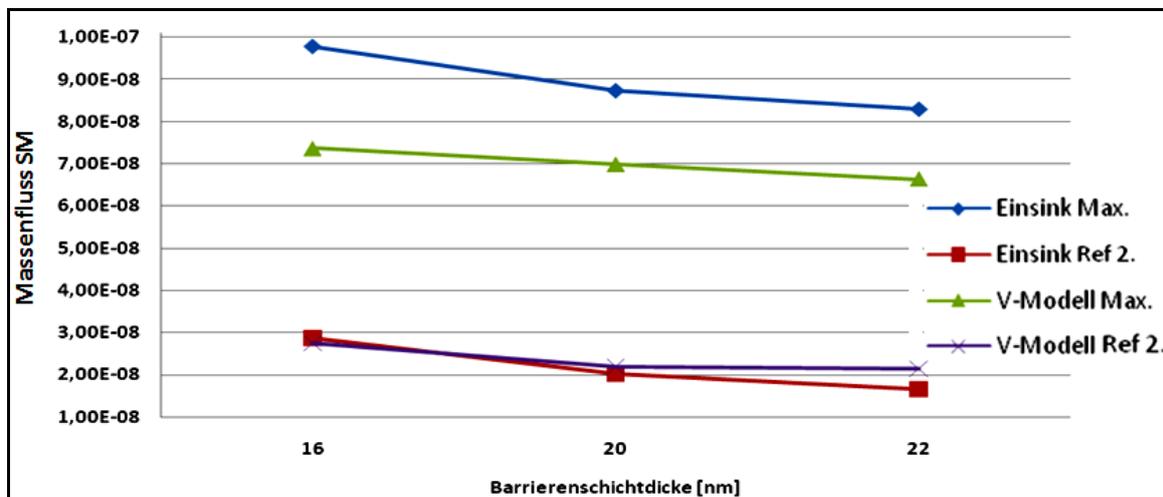


Bild 5.23: Massenfluss durch Stressmigration im Einsink und im V-Modell (32nm) bei unterschiedlichen Barrierschichtdicken.

Zusammenfassend stellte man fest, dass die höchsten Massenflüsse an den Kanten der Durchkontaktierung ermittelt (Referenzpunkte eins und zwei) wurden. Die Werte unter dem Boden der Durchkontaktierung (Referenzpunkt drei) und in der Leitbahn (Referenzpunkte vier und fünf) konnten hingegen häufig vernachlässigt werden. Die Wahl einer dickeren Barrierschicht reduziert den Massenfluss, sowohl in Bezug auf die Elektro- als auch in Bezug auf die Stressmigration, dies gilt unabhängig von der gewählten Technologiegröße oder der gewählten Form der Durchkontaktierung. Eine dickere Barriere führt jedoch auch zu einem höheren Leitbahnwiderstand und einer entsprechend vergrößerten RC-Verzögerung.

Im V-Modell wurden für alle gewählten Technologiegrößen und Barrierticken geringere Massenflüsse durch Elektro- und Stressmigration festgestellt als im Einsinkmodell. Es ist notwendig die Massenflussdivergenzen näher zu untersuchen, da aufgrund dieser Erkenntnis die Möglichkeit besteht, dass die Wahl der V-Form für Durchkontaktierungen eine höhere Zuverlässigkeit ermöglicht als ein Einsink-Via.

5.4.2 Einfluss unterschiedlicher Deckschichtdicke

Um den Einfluss unterschiedlicher Deckschichtdicke auf das Zuverlässigkeitsverhalten in Bezug auf die Massenflüsse durch EM und SM zu bestimmen, wird am Einsink-, V- und

VRundmodell die Dicke der Deckschicht variiert. Bei der 32nm Technologieknoten beträgt die untersuchte Dicke jeweils 20, 25 und 30 nm. Bei der 45nm Technologieknoten beträgt die untersuchte Dicke 30, 35 und 40 nm.

5.4.2.1 Einfluss unterschiedlicher Deckschichtdicke auf den Massenfluss durch Elektromigration

Um den Einfluss der Deckschichtdicke auf den Massenfluss durch EM zu bestimmen, müssen die Stromdichte und die Temperatur bzw. Temperaturerhöhung an der Auswertungsstelle genauer untersucht werden. Die SiCN Deckschicht besitzt einen höheren (um den Faktor $1E+13$) spezifischen Widerstand und eine kleinere (um den Faktor 365) Wärmeleitfähigkeit im Vergleich zur Cu-Metallisierung. Die Dicke der Deckschicht hat keinen nennenswerten Einfluss auf die Stromdichte und Temperaturerhöhung in der Metallisierung. Dadurch bleiben die Massenflüsse durch EM in den Referenzpunkten 1, 2 und 3 konstant. Die Änderungen der maximalen Massenflussbeträge durch EM sind somit vernachlässigbar klein. In Bild 5.24 sind beispielhaft die Massenflüsse durch EM bei dem 32nm-Einsinkmodell in den Orten der Maxima sowie Referenzstellen grafisch dargestellt.

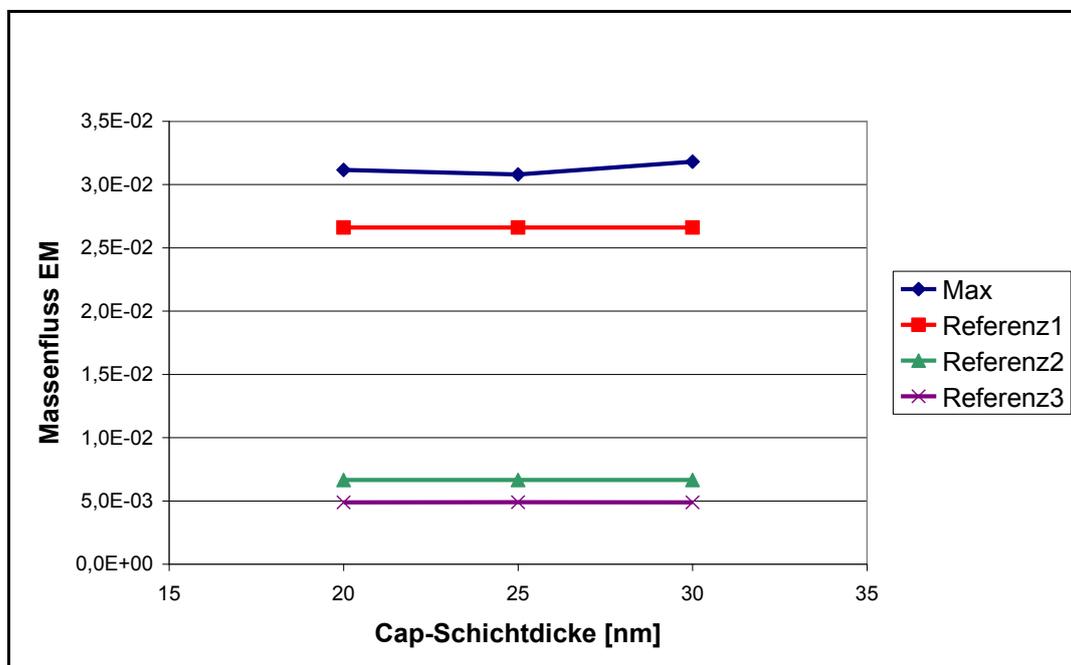


Bild 5.24: Genereller Einfluss unterschiedlicher Deckschichtdicke bei EM-Testbedingung, 32nm.

5.4.2.2 Einfluss unterschiedlicher Deckschichtdicke auf den Massenfluss durch Stressmigration

Bei der Betrachtung der Massenflüsse durch SM sind die Stressgradienten maßgebend. Die Stressgradienten wurden hauptsächlich durch die Änderung des hydrostatischen Stresses hervorgerufen. Der Stress wird durch das EModul und die Unterschiede der thermischen Ausdehnungskoeffizienten während des Herstellungsprozesses induziert. SiCN ist ein festeres Material mit geringerem thermischem Ausdehnungskoeffizienten im Vergleich zu Cu. Die SiCN-Schicht hat ein um den Faktor 1.4 größeres EModul und einen um den Faktor 1.5 niedrigeren thermischen Ausdehnungskoeffizient als Kupfer. Eine dickere Deckschicht hat einen Einfluss auf die Stressverteilung in der Metallisierung. Bei dem Einsink- und VModell steigen generell die Stressgradienten sowohl an den maximalen Stellen als auch in den Referenzpunkten durch eine dickere Deckschicht an.

Eine Ausnahme bildet das 32nm-Einsinkmodell in dem Referenzpunkt 3, die Stressgradienten werden an dieser Stelle um 2 bis 6% niedriger. Jedoch sind diese Beträge so klein, dass sie in Bezug auf die anderen Beträge in anderen Referenzpunkten vernachlässigt werden können. In Bild 5.25 ist der Einfluss unterschiedlicher Deckschichtdicke bei SM-Testbedingung am 32nm-Einsinkmodell dargestellt.

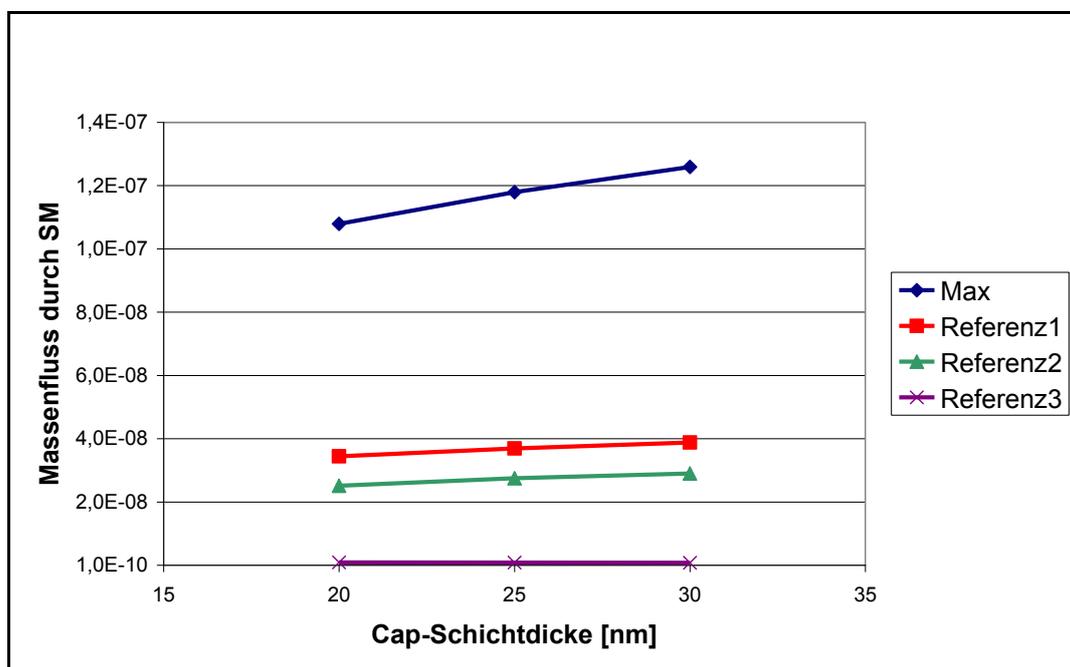


Bild 5.25: Einfluss unterschiedlicher Deckschichtdicke bei SM-Testbedingung 32nm-Einsinkmodell.

Aus dem Bild 5.25 geht hervor, dass sich der Massenfluss durch SM an maximalen Stellen von 20 auf 30nm Deckschichtdicke um 16.7% und von 25 auf 20nm um 6.8% erhöht. In den Referenzpunkten 1 und 2 stellt sich das gleiche Zunahmeverhältnis ein. In diesen

Referenzpunkten nehmen die Massenflüsse von 20 auf 30nm um 15.4% und von 25 auf 30nm um 5.4% zu.

Bei der Betrachtung des VRundmodells fällt auf, dass sich das Verhältnis des Einflusses unterschiedlicher Deckschichtdicke sehr mit dem des Einsink- und VModells ähnelt. Jedoch nehmen die Massenflüsse bei dickerer Deckschicht an den maximalen Stellen geringfügig ab. Das Bild 5.26 zeigt weiterhin den Einfluss unterschiedlicher Deckschichtdicke am Beispiel eines 32nm-VRundmodells.

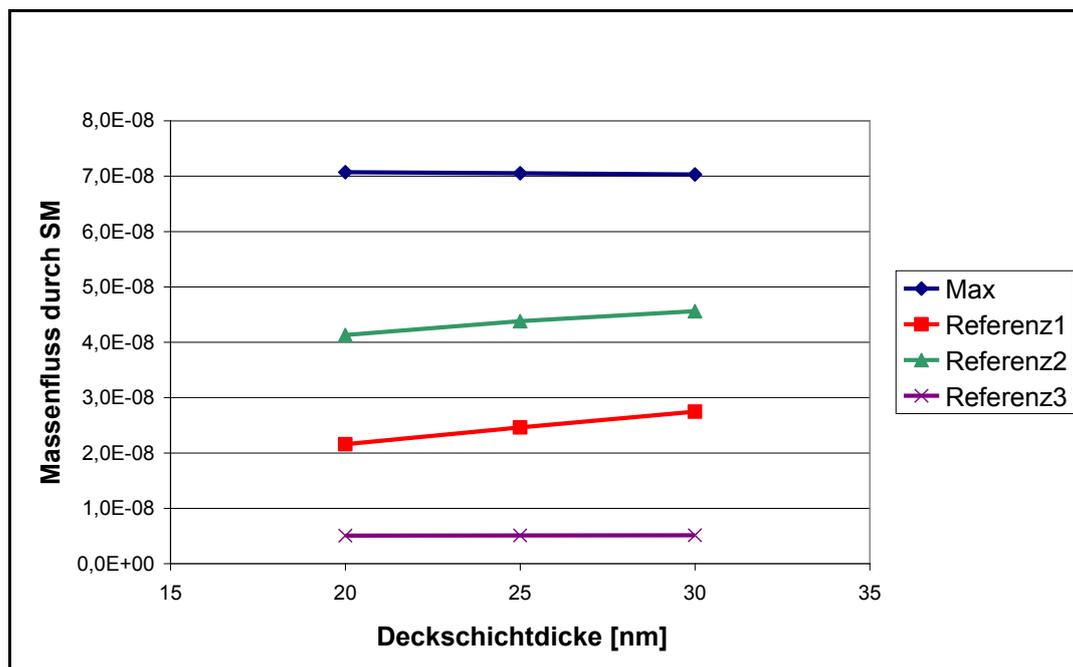


Bild 5.26: Einfluss unterschiedlicher Deckschichtdicke bei SM-Testbedingung 32nm-VRundmodell.

Am Bild 5.26 ist feststellbar, dass die Massenflüsse durch SM an maximalen Stellen von 20 auf 30nm Deckschichtdicke um 0.56% und von 25 auf 20nm um 0.28% abnehmen. Jedoch kann man diese Beträge ähnlich wie bei dem Referenzpunkt 3 vernachlässigen. Im Referenzpunkt 1 nehmen die Massenflüsse durch SM von 20 auf 30nm um 27.4% und von 25 auf 30nm um 11.6% zu. Im Referenzpunkt 2 steigen die Massenflüsse durch SM von 20 auf 30nm um 10.4% und von 25 auf 30nm um 4.1% an. Zu benennen ist außerdem, dass die Massenflüsse in dem Referenzpunkt 2 höher als in dem Referenzpunkt 1 liegen. Dies ist bei dem Einsink- und VModell der umgekehrte Fall.

Die maximalen Massenflüsse beim Einsink- und VModell befinden sich meistens am Boden der Durchkontaktierung. Bei den VRundmodellen findet ein Ortswechsel des maximalen Massenflusses statt. Dieser befindet sich an der Ecke der unteren Metallisierung, während er

bei dem Einsinkmodell noch in der Cu der Durchkontaktierung liegt. Da die Stressgradienten der treibende Faktor für den Massenfluss durch Stressmigration sind und die Vorzugsrichtung des Massenflusses entgegengesetzt den Stressgradienten zeigt, wird dieser Ortswechsel auch bei der Darstellung der Stressgradienten offensichtlich. In Bild 5.27 sind die Stressgradienten des Einsink-/VModells und des VRundmodells am Beispiel eines 32nm-Modells mit der Deckschichtdicke 25nm dargestellt.

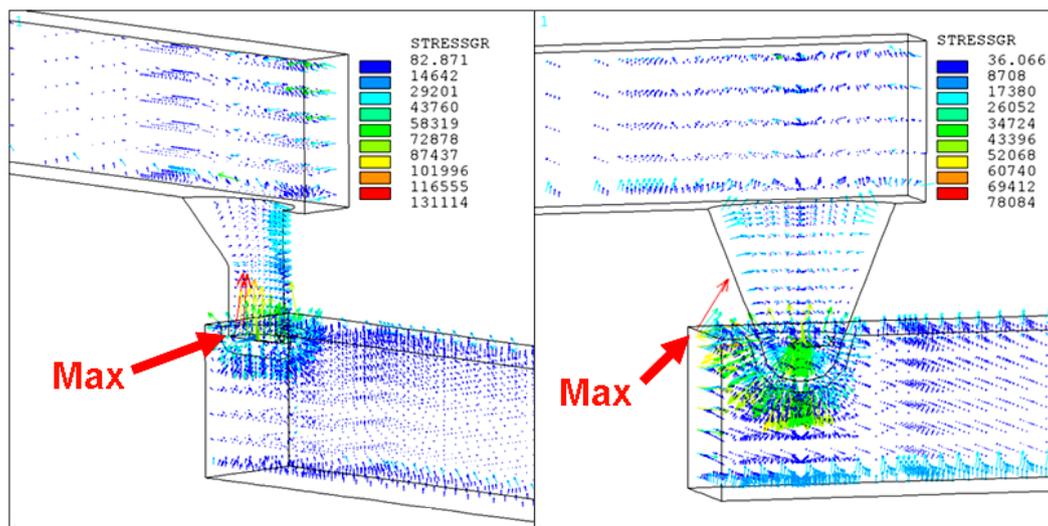


Bild 5.27: Stressgradienten [Pa/μm] 32nm-Einsink und 32nm-VRundmodell, Deckschichtdicke 25nm.

Zusammenfassend ist feststellbar, dass sich im Allgemeinen der Stress in der Metallisierung durch eine dickere Deckschicht schlechter entwickelt. Durch eine dickere Deckschicht hat man die Bereiche mit höheren EModul und CTE-Unterschieden in der Metallisierung vergrößert und somit Nachteile für die Entwicklung des Massenflusses durch SM in der Metallisierung gebracht. Diese Aussage resultiert ebenfalls aus der näheren Betrachtung der jeweiligen Referenzpunkte.

5.4.3 Einfluss unterschiedlicher Deckschichtmaterialien

Um den Einfluss unterschiedlicher Deckschichtmaterialien SiCN und SiN auf das Zuverlässigkeitsverhalten in Bezug auf die Massenflüsse durch EM und SM herauszufinden, wurden am Einsink-, V- und VRundmodell die Materialparameter geändert. Die Untersuchung wurde bei dem 45nm Technologieknoten durchgeführt.

5.4.3.1 Einfluss unterschiedlicher Deckschichtmaterialien auf den Massenfluss durch Elektromigration

Obwohl die SiN-Schicht eine um den Faktor 20 höhere thermische Leitfähigkeit als SiCN besitzt, wurde es wie erwartet festgestellt, dass diese auf die Stromdichte, die Temperaturverteilung und somit auf den Massenfluss durch EM in der Cu-Metallisierung keinen nennenswerten Einfluss nimmt. Dieser Fall gilt für alle betrachteten Modelle der Durchkontaktierung.

5.4.3.2 Einfluss unterschiedlicher Deckschichtmaterialien auf den Massenfluss durch Stressmigration

Im Vergleich mit SiCN ist SiN ein festeres Material mit geringem thermischem Ausdehnungskoeffizienten. Die SiN-Schicht hat ein um den Faktor 2.5 größeres EModul und einen um den Faktor 5.2 niedrigeren CTE im Vergleich zur Cu-Metallisierung. Es ist feststellbar, dass die Verwendung von SiN im Allgemeinen eine Entspannung der Cu-Metallisierung durch eine Volumenänderung bewirkt. Für alle betrachteten Modelle nimmt der hydrostatische Stress generell durch die Verwendung von SiN-Deckschichtmaterial ab. In dieser Hinsicht bildet das Einsinkmodell die Ausnahme am Referenzpunkt 1. Der hydrostatische Stress nimmt in diesem Referenzpunkt zu. In Bild 5.28 ist der Einfluss unterschiedlicher Deckschichtmaterialien mit SM-Randbedingung zuerst bei dem 45nm-Einsinkmodell dargestellt.

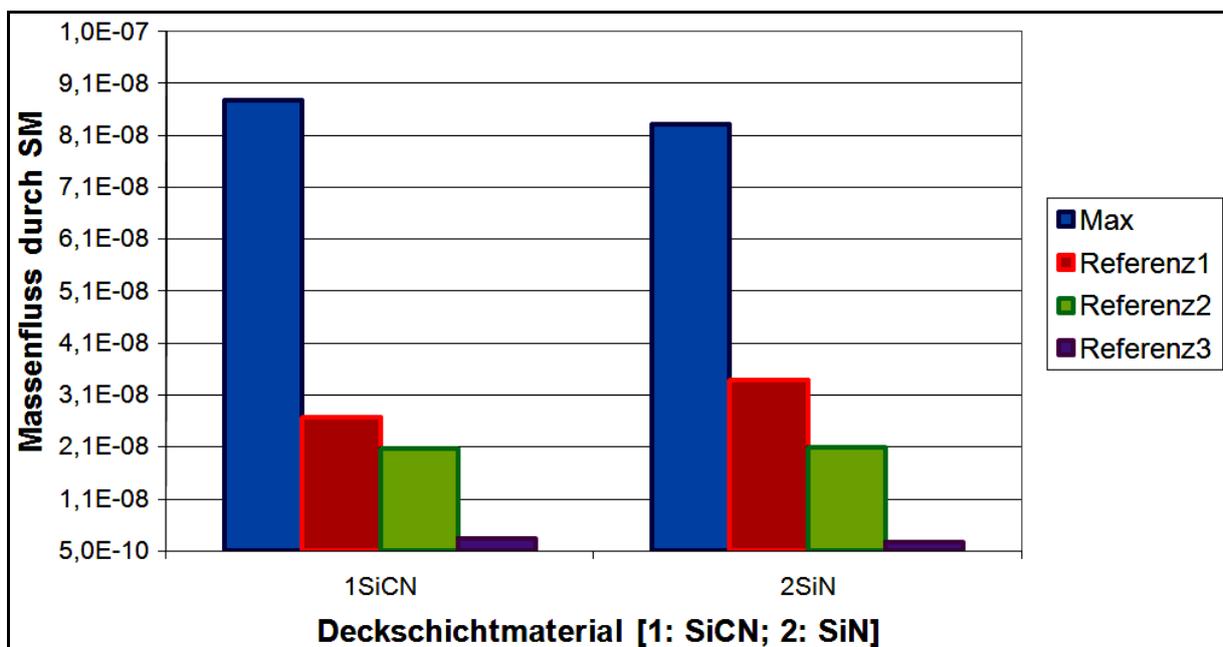


Bild 5.28: Einfluss unterschiedlicher Deckschichtmaterialien bei SM-Testbedingung 45nm-Einsinkmodell.

Aus dem Bild 5.28 geht hervor, dass die Massenflüsse durch SM an der maximalen Stelle zwischen SiCN und SiN um 5.7%, im Referenzpunkt 3 um 40.5% abnehmen. Im Referenzpunkt 1 erhöhen sich die Massenflüsse um 21.5% und im Referenzpunkt 2 um 1.5%.

Die Zunahme des Stresses im Referenzpunkt 1 liegt darin begründet, dass der eingesunkene Boden der Durchkontaktierung bei der Einsinkgeometrie eine Schubbelastung in dem Bereich durch Volumenausdehnung der Metallisierung anregt. Ein Unterdrückungseffekt der Volumenausdehnung entsteht durch die festere SiN-Schicht und parallel hierzu steigt der Stress im Referenzpunkt 1. Die Änderung des hydrostatischen Stresses führt in diesem Fall zu höheren Stressgradienten und gleichzeitig zu höheren Massenflüssen durch SM.

Bei den V- und VRundmodellen verhalten sich die Massenflüsse durch SM identisch, deshalb wird in Bild 5.29 der Einfluss unterschiedlicher Deckschichtmaterialien anhand des 45nm-VRundmodell gezeigt.

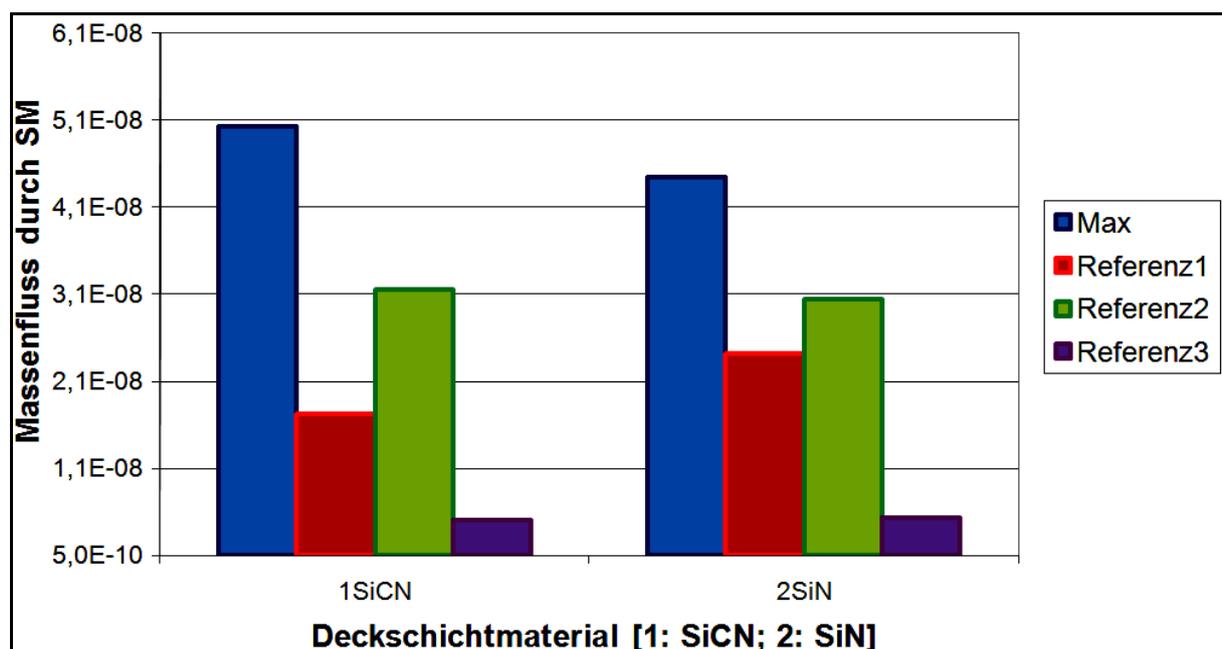


Bild 5.29: Einfluss unterschiedlicher Deckschichtmaterialien bei SM-Testbedingung, 45nm-VRundmodell.

Am Bild 5.29 stellte man fest, dass die Massenflüsse durch SM an der maximalen Stelle zwischen SiCN und SiN um 13.2%, im Referenzpunkt 2 um 3.7% abnehmen. Im Referenzpunkt 1 erhöhen sich die Massenflüsse um 29.5% und im Referenzpunkt 3 um 5%. Dieses Verhältnis ist dem von Einsinkmodell ähnlich, jedoch liegen die Beträge der Massenflüsse im Referenzpunkt 2 höher als im Referenzpunkt 1. Die maximalen Stellen der Massenflüsse durch SM unterscheiden sich zwischen V-/VRundmodell und Einsinkmodell.

Bei dem V-/VRundmodell findet man das Maximum auf der Oberkante der Metallisierung und bei dem Einsinkmodell am Boden der Durchkontaktierung. Anhand der Verteilung der Stressgradienten aus dem Bild 5.27 kann man dieses Verhalten analog veranschaulichen.

Zusammenfassend stellte man fest, dass die Verwendung der SiN-Schicht bzw. eines festeren Materials als mit einer niedrigeren CTE als SiCN überwiegend Vorteile für die Stressentwicklung in der Metallisierung bringt. Jedoch muss man den Bereich des Boden der Durchkontaktierung im Referenzpunkt 2 noch genauer untersuchen, denn es kann in diesem Bereich zu einer bruchmechanischen Erscheinung der Barriere infolge der höheren Schubbelastung führen.

5.5 Einfluss unterschiedlicher Dielektrika mit SM-Randbedingung

Abschließend wird der Einfluss unterschiedlicher Dielektrika wie SiCOH, TEOS, ULK, FTEOS und OMCTS auf das Zuverlässigkeitsverhalten in Bezug auf die Massenflüsse durch SM untersucht. Die Untersuchung wurde bei dem 45nm-Einsink und 45nm-VRundmodell durchgeführt. Die Dielektrika haben im Allgemeinen einen sehr ähnlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten (CTE) wie SiCOH und nur ULK hat einen um den Faktor 2.1 höheren CTE als SiCOH. Um den Überblick über die unterschiedlichen mechanischen Parameter der Dielektrika zu verschaffen werden die E-Moduln und CTE in der Tabelle 5.4 eingetragen.

Dielektrika	SiCOH	TEOS	ULK	FTEOS	OMCTS	Einheit
EModul	1,55E+04	7,00E+04	4,30E+03	5,60E+04	7,00E+03	μPa
CTE	1,70E-05	1,70E-05	3,65E-05	1,70E-05	1,70E-05	1/K

Tab. 5.4: Mechanische Materialparameter der unterschiedlichen Dielektrika [41, 47, 48, 62, 70].

Zuerst werden in Bild 5.30 die Massenflüsse durch SM bei den unterschiedlichen Dielektrika am 45nm-Einsinkmodell dargestellt.

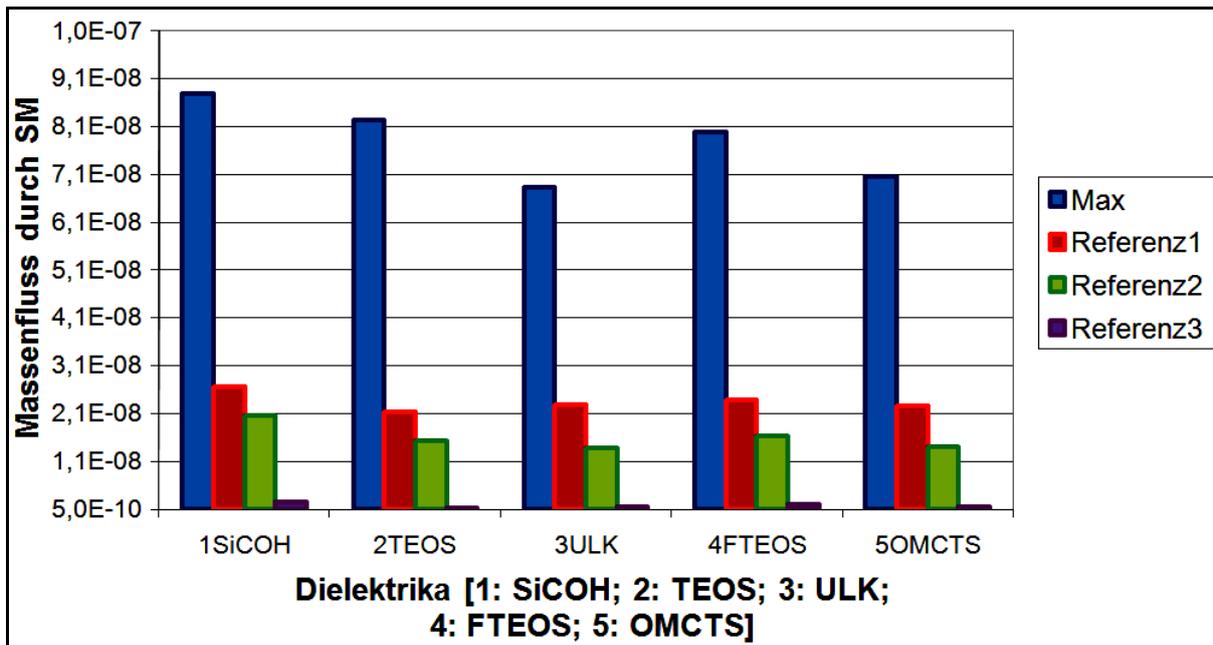


Bild 5.30: Einfluss unterschiedlicher Dielektrika bei dem 45nm-Einsinkmodell.

Am Bild 5.30 stellte man fest, dass durch die unterschiedlichen Dielektrika die Massenflüsse durch SM generell abnehmen. Die Tabelle 5.5 stellt das Abnahmeverhältnis zwischen SiCOH und dem jeweiligen Dielektrikum an den maximalen Stellen und Referenzpunkten bei dem Einsinkmodell dar.

Vergleich SiCOH mit	TEOS [%]	ULK [%]	FTEOS [%]	OMCTS [%]
Max	6,59	28,91	9,94	24,50
Ref. 1	25,96	16,96	12,54	19,09
Ref. 2	34,90	51,13	27,22	47,79
Ref. 3	140,18	91,76	37,18	123,62

Tab. 5.5: Abnahmeverhältnisse [%] durch die unterschiedlichen Dielektrika beim 45nm-Einsinkmodell.

Weiterhin werden in Bild 5.31 die Massenflüsse durch SM bei den unterschiedlichen Dielektrika am 45nm-VRundmodell dargestellt.

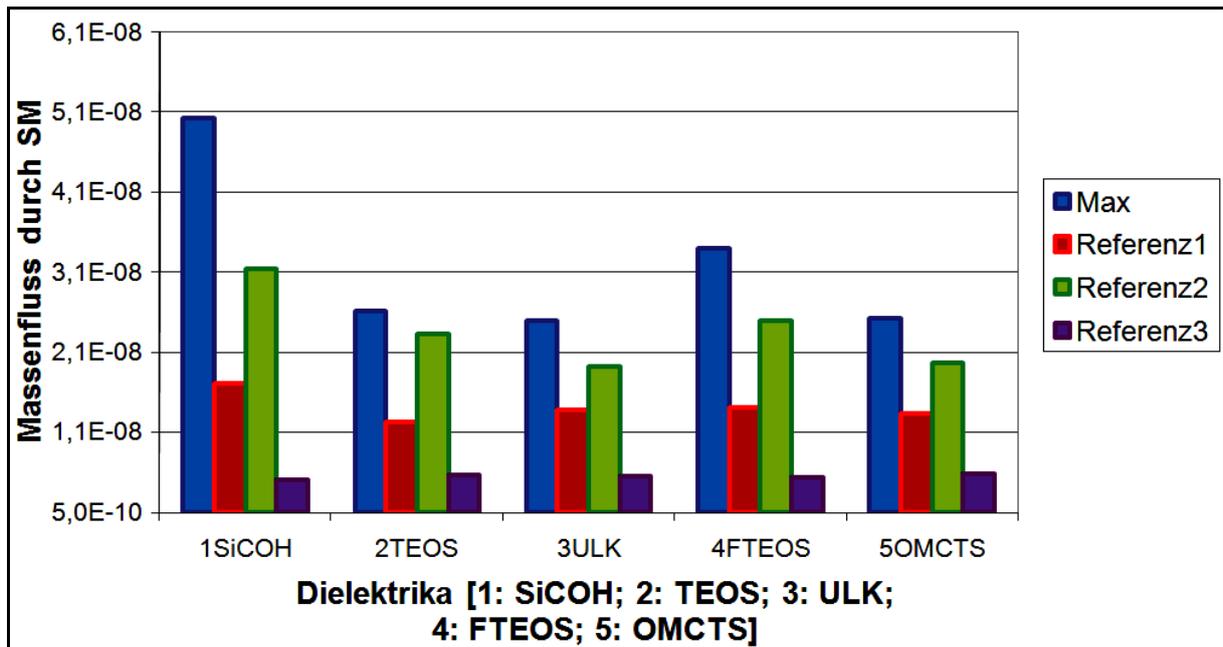


Bild 5.31: Einfluss unterschiedlicher Dielektrika bei dem 45nm-VRundmodell.

Am Bild 5.31 lässt sich ebenfalls feststellen, dass durch die unterschiedlichen Dielektrika die Massenflüsse durch SM generell abnehmen. Die Abnahmeverhältnisse sind bei dem VRund noch deutlicher als bei dem Einsinkmodell. Nur im Referenzpunkt 3 nehmen die Massenflüsse zu, jedoch sind die Zunahmeverhältnisse im Vergleich mit den Abnahmeverhältnissen sehr gering, sodass man sie vernachlässigen kann. Die Tabelle 5.6 stellt das Abnahmeverhältnis zwischen SiCOH und dem jeweiligen Dielektrikum an den maximalen Stellen und Referenzpunkten bei dem Einsinkmodell dar. Die negativen Vorzeichen deuten auf eine Zunahme des Stresses im Vergleich zu den ansonsten abnehmenden Verhältnis.

Vergleich SiCOH mit	TEOS [%]	ULK [%]	FTEOS [%]	OMCTS [%]
Max	93,77	103,27	48,66	101,62
Ref. 1	41,53	25,94	21,99	30,47
Ref. 2	35,53	65,24	26,12	61,36
Ref. 3	-13,71	-11,09	-7,66	-14,37

Tab. 5.6: Abnahmeverhältnisse [%] durch die unterschiedlichen Dielektrika bei 45nm-VRundmodell.

Letztlich ist festzustellen, dass sich der Stress in der Metallisierung durch die Verwendung unterschiedlicher Dielektrika mit anderem E-Modul jedoch demselben oder aber höheren thermischen Ausdehnungskoeffizienten wie SiCOH besser entwickeln. Dadurch reduzieren sich die Massenflüsse durch SM in der Metallisierung.

Zusammenfassend führt die Untersuchung der Parametereinflüsse unabhängig von dem Technologieknoten zu einer Vorstellung des günstigsten Modells in Bezug auf die Zuverlässigkeitsaspekte mit folgenden Parametern:

- Geometrie der Durchkontaktierung : VRund- und V-Modell
- Dicke der Barriere [nm] : 16.4 bei 32nm und 22 bei 45nm
- Dicke der Deckschicht [nm] : 20 bei 32nm und 30 bei 45nm
- Deckschichtmaterial : SiN
- Dielektrikum : ULK und OMCTS

6 Mikrorissbildung in der Ta-Barriere

In diesem Kapitel wird der Einfluss der Stressverteilung am Durchkontaktierungsboden in Bezug auf eine mögliche bruchmechanische Erscheinung in der Ta-Barrierschicht erörtert. Die Verwendung der 4-Via-Modelle am Beispiel des 45nm Technologieknotens spiegelt eine Weiterführung der Analyse der Stressverteilung aus dem vorangegangenen Kapitel 5 wider. Zuerst wurden die Schwachstellen der 4-Via-Modelle in Bezug auf die Bruchmechanik anhand des ersten Hauptspannungskriteriums analysiert. Danach wurden die Mikrorissorte in der Ta-Barriere am Durchkontaktierungsboden prognostiziert. Die entstehende Porosität wurde anschließend anhand des Porositätsfaktors quantitativ charakterisiert. Die Anwendung des Hauptspannungskriteriums zur Rissbildungsbestimmung und die damit verbundene quantitative Bestimmung der Porosität wurden erstmalig bei der Stressanalyse von ULSI-Metallisierungen eingesetzt. Unter dem Begriff „Porosität“ versteht man das Verhältnis des Hohlraumvolumens zu dem gesamten betrachteten Volumen.

6.1 Schwachstellenanalyse der 4-Via-Modelle

Um die Schwachstellen der Barriere in der Struktur in Bezug auf die Bruchmechanik zu analysieren wurde die FE-Berechnung unter EM-Testbedingungen durchgeführt. Als Maß der entstehenden Schubbelastung wurde zunächst der VMS herangezogen. In Bild 6.1 ist der VMS für die gesamte Struktur der 4-Via-Modelle zusammen mit ihrer deformierten Geometrie dargestellt.

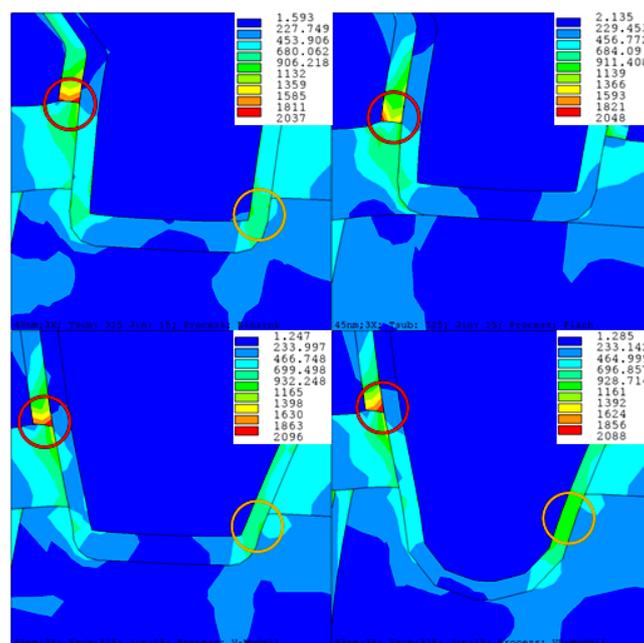


Bild 6.1: VMS-Verteilung [MPa] an 45nm-Modellen bei 325° C.

Die Barrierschicht aus Ta/TaN hat das höchste E-Modul in der Metallisierungsstruktur, aus diesem Grund entsteht im Allgemeinen der maximale Stress in der Barrierschicht. In Bild 6.1 sind Stellen der TaN-Barriere mit einem Stress bis zu 2000 MPa mit roten Kreisen gekennzeichnet. An diesen Stellen treffen die Deckschicht und die TaN-Barriere aufeinander und die Barriere würde an dieser Stelle ausreisen. Dies ist die mögliche Erklärung für die Rissbildung nach der Herstellung der Durchkontaktierung in diesem Bereich, s. Seite 7 und 21.

Die orangen Kreise in Bild 6.1 markieren die kritischen Stellen bei Modellen mit eingesunkenem Boden der Durchkontaktierung. Mit Ausnahme des Flachmodells führt an diesen Stellen die Ausdehnung des Kupfers in der ersten Metallisierung und in der Durchkontaktierung gleichzeitig zu einer tensilen sowie kompressiven Belastung am Boden der Durchkontaktierung. Die Ausdehnung verursacht ebenfalls eine hohe Schubbelastung. Die Simulationsergebnisse haben gezeigt, dass ein VMS von mehr als 1000 MPa in die Ta-Barriere induziert wurde [25, 27]. Dieser Stresswert kann zu einer lokalen bruchmechanischen Erscheinung in der Ta Barriere führen, wodurch Porosität infolge des hohen Stresses entstehen kann. Dieser hohe Stresswert ist auch in Bild 6.1 zu sehen.

Um die Position der bruchmechanischen Erscheinungen vorherzusagen wird nun das erste Hauptspannungskriterium verwendet. Ein Material weist Risse auf, wenn eine der drei Hauptspannungskomponente seine Zugfestigkeit (im Englischen: Ultimate Tensile Strength, UTS) überschreitet. Die Schwachstelle der Struktur liegt somit in den Bereichen mit maximalen Hauptspannungen, welche den UTS-Wert überschreiten. Aus dem Spannung-Dehnung-Diagramm wurde ein Wert des UTS des Tantal von 900 MPa abgelesen [3] und dieser Wert wurde für die Vorhersage der Rissbildung in der Ta-Barriere angesetzt.

Im Weiteren werden die drei Hauptspannungskomponente σ_1 , σ_2 and σ_3 berechnet und anschließend mit dem UTS verglichen. In Bild 6.2 ist der erste Hauptstress σ_1 in der Ta-Barriere der 4-Via-Modelle dargestellt.

Die verwendete Netzfeinheit von dem Gesamtmodell und von dem Submodell wurde bei der Voruntersuchung der Stressanalyse so gewählt, dass die Stresswerte des Submodells noch innerhalb einer betragslichen Abweichung von 1% liegen. Somit gelten die Modelle als ausreichend fein vernetzt.

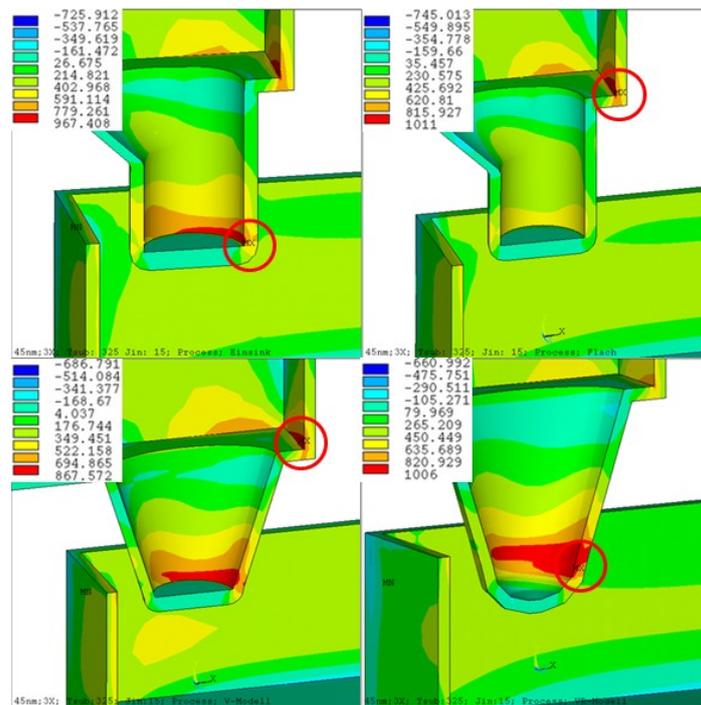


Bild 6.2: σ_1 -Verteilung [MPa] in der Ta-Barriere an 45nm-Modellen bei 325° C.

Da der σ_2 und σ_3 unterhalb von σ_1 und UTS liegen, wurde die Verteilung von σ_2 und σ_3 in der Ta-Barriere nicht dargestellt. Nach dem Hauptspannungskriterium haben sie keinen Einfluss auf die Rissbildungsprädiktion. Aus Bild 6.2 ist zu entnehmen, dass sich bei dem Einsink- und VRundmodell die eingesunkene Stelle (mit rotem Kreis markiert) am Durchkontaktierungsboden als Schwachstelle der Ta-Barriere erweist. Das Maximum des σ_1 , welches größer ist als 967 MPa, befindet sich dort. Die Ta-Barriere an der Unterkante der oberen Metallisierung erfährt ebenfalls einen hohen σ_1 von ca. 800 MPa. Bei dem Flach- und V-Modell liegt die mit roten Kreisen versehene Schwachstelle eher an der Unterkante der oberen Metallisierung, wobei die Ta-Barriere am Viaboden des V-Modells ebenfalls mit einem hohen σ_1 von ca. 800 MPa behaftet ist.

Bei dem Flachmodell wurde ein σ_1 von ca. 500 MPa in der Ta-Barriere am Viaboden induziert, dieser Wert liegt weit unterhalb des angenommenen UTS von 900 MPa. Am Durchkontaktierungsboden des Flachmodells ist die Ta-Barriere somit gegenüber der bruchmechanischen Erscheinung nicht anfällig. Dies liegt darin begründet, dass durch den flach angesetzten Durchkontaktierungsboden die hohe Schubbelastung durch eine Ausdehnung in der unteren Metallisierung nicht gegeben ist (Bild 6.1).

In der Praxis treten Barrierenbrüche an Schwachstellen auf, an denen der UTS ggf. möglicherweise überschritten wird.

6.2 Rissbildungsvorhersage in der Ta-Barriere im Submodell

Die Technik der Submodellierung wurde für die Stressberechnung verwendet, um die bruchmechanische Analyse im Bereich des Durchkontaktierungsbodens abzugrenzen und später die lokale Porosität der Ta-Barriere zu ermitteln. Bei der Verwendung dieser Technik mussten vorher einige Berechnungsschritte durchgeführt werden. Die lokale Stressverteilung unter Berücksichtigung des Herstellungsprozesses wird zuerst durch diejenige Stressverteilung infolge der Berechnung anhand einer Anpassungsreferenztemperatur (T_{Anp}) annähernd ersetzt. Die T_{Anp} gilt dann ausschließlich für die lokale Rissbildungsprädiktion und Porositätscharakterisierung in der Ta-Barriere des Durchkontaktierungsbodens. Am Beispiel des Einsinkmodells wird dieser Näherungsschritt noch mal erläutert. Der aus dem Bild 6.2 ersichtliche Stresszustand in der Ta-Barriere mit einem maximalen σ_1 von 967 MPa am Durchkontaktierungsboden wurde durch eine Stressverteilung mit der Berechnung anhand der T_{Anp} annähernd ersetzt. In Bild 6.3 ist die Stressverteilung in der Ta-Barriere mit einer T_{Anp} von jeweils 45, 48 und 50° C bei dem Submodell der Einsink-Geometrie dargestellt.

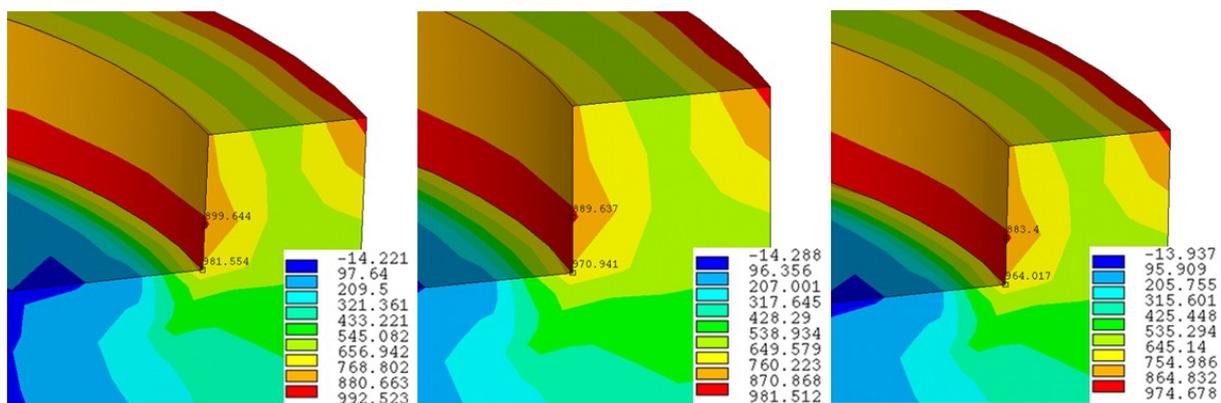


Bild 6.3: σ_1 -Verteilung [MPa] in der Ta-Barriere des Submodells der Einsink-Geometrie, T_{Anp} 45, 48 und 50° C.

An der Ecke des Durchkontaktierungsbodens (Bild 6.3) tritt ein σ_1 von 970 MPa aus der Berechnung mit T_{Anp} von 48° C auf. Im Vergleich mit den Ergebnissen aus der Berechnung mit T_{Anp} von 45 und 50° C kommt dieser Wert dem gewünschten σ_1 -Wert von 967 MPa am Nächsten. Für die Porositätsanalyse der Ta-Barriere am Einsinkmodell gilt dann die T_{Anp} von 48° C. Analog dazu ergibt sich eine T_{Anp} von 38° C für die Analyse am VRundmodell, T_{Anp} von 80° C am V-Modell und T_{Anp} von 140° C am Flachmodell.

In Bild 6.4 ist der VMS am Submodell der 4-Via-Modelle zur genaueren Veranschaulichung der entstehenden Schubbelastung am Durchkontaktierungsboden dargestellt.

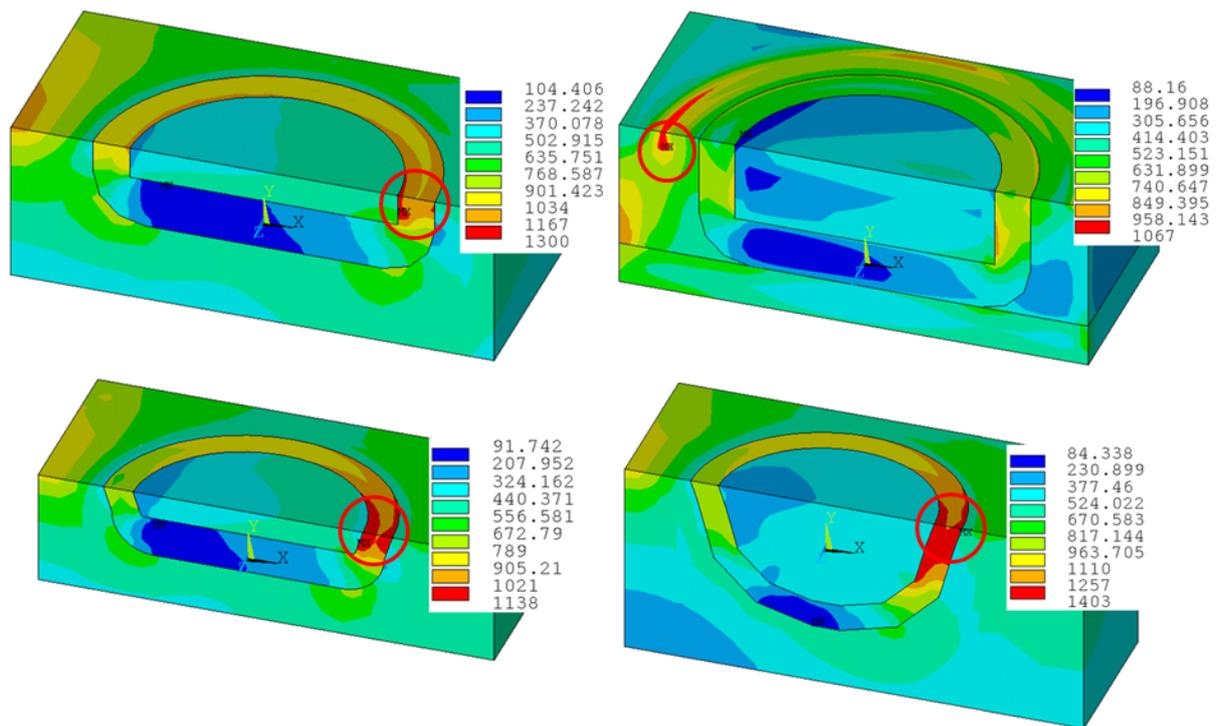


Bild 6.4: VMS-Verteilung [MPa] des Submodells der 4-Via-Modelle.

Mittels Bild 6.1 und 6.4 kann man eine Übereinstimmung der VMS-Verteilung zwischen dem Gesamt- und Submodell finden. In den Modellen mit einem verankerten Boden der Durchkontaktierung (Einsink-, V- und VRundmodell) konzentrieren sich die maximalen mit roten Kreisen markierten Schubbelastungen durch die Ausdehnung des Cu im Einsinkbereich des Durchkontaktierungsbodens und in der Nähe der Deckschicht. Der Stress in der Ta-Barriere wird durch die Deckschicht höher, dieser beträgt bei den Modellen mit dem verankerten Boden jeweils mehr als 1000 MPa. An der Ta-Barriere des Flachmodells ist dagegen kein hoher VMS in diesem Bereich zu erkennen. Die Barriere ist durch den flach angesetzten Durchkontaktierungsboden von der Schubbelastung entlastet. In diesem Bereich erkennt man an der hell blauen Farbskalierung einen VMS der Ta-Barriere von weniger als 400 MPa. Die flache Modellierung des Durchkontaktierungsbodens ergibt somit die günstigste Stressverteilung in der Ta-Barriere in Bezug auf die Bruchmechanik.

Außerdem erkennt man an der dargestellten Stressverteilung im Flachmodell wieder, dass der VMS in der Deckschicht höher ist als in der Barriere. Das Maximum ist mit einem roten Kreis markiert und liegt nah an der Stelle, an der die Deckschicht auf die TaN-Barriere aufeinander treffen, s. Bild 6.1. Dies zeigt weiterhin eine mögliche Erklärung für die Rissbildung nach dem Herstellungsprozess der Durchkontaktierung in diesem Bereich, s. Bild 3.4 Seite 21 [10, 22].

In Bild 6.5 ist die σ_1 -Verteilung der Ta-Barriere der 4-Via-Modelle am Boden detaillierter dargestellt.

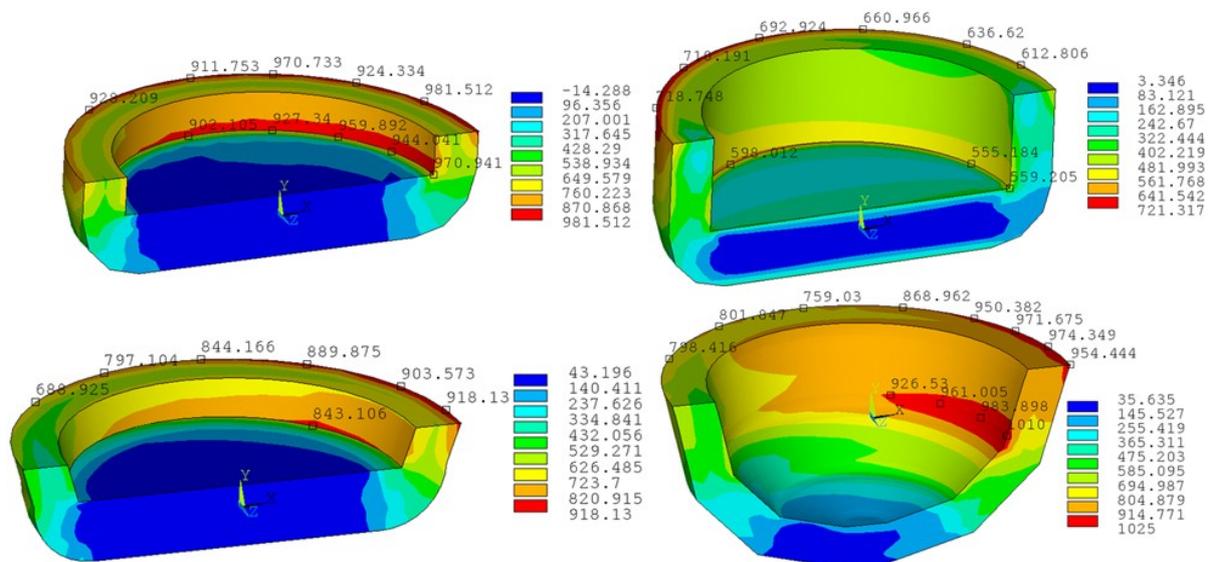


Bild 6.5: σ_1 -Verteilung [MPa] der 4-Via-Modelle in der Ta-Barriere als Submodell.

Mit Hilfe von Bild 6.2 und 6.5 kann man bei Einsink- und VRundmodell einen σ_1 Bereich mit hohen Werten von ca. 900 bis 1000 MPa in der Ta-Barriere am Durchkontaktierungsboden erkennen. Das σ_1 -Maximum befindet sich im Durchkontaktierungsboden in der Nähe der Deckschicht. Weiter findet man bei dem Einsinkmodell hohe σ_1 -Werte auch am Boden des Cu in der Durchkontaktierung und bei dem VRundmodell am verankerten verundeten Boden des Cu in der Durchkontaktierung.

Bei dem V-Modell bewirkt diese V-Geometrie mit einem flachen Boden eher eine Entspannung der Volumenausdehnung der Ta-Barriere und dementsprechend eine Entspannung der Hauptspannungskomponente. Nur ein kleiner Bereich im Durchkontaktierungsboden in der Nähe der Deckschicht erreicht ein σ_1 -Maximum von mehr als 900 MPa. Bei dem Flachmodell wurde für die Rissbildung kein kritischer Stress festgestellt. Die Stresswerte liegen weit unterhalb des angenommenen UTS von 900 MPa, deshalb wird das Flachmodell bei der quantitativen Bestimmung der Porosität nicht weiter betrachtet. In Bild 6.6 sind die Rissbildungshinweise in der Ta-Barriere im Submodell dargestellt.

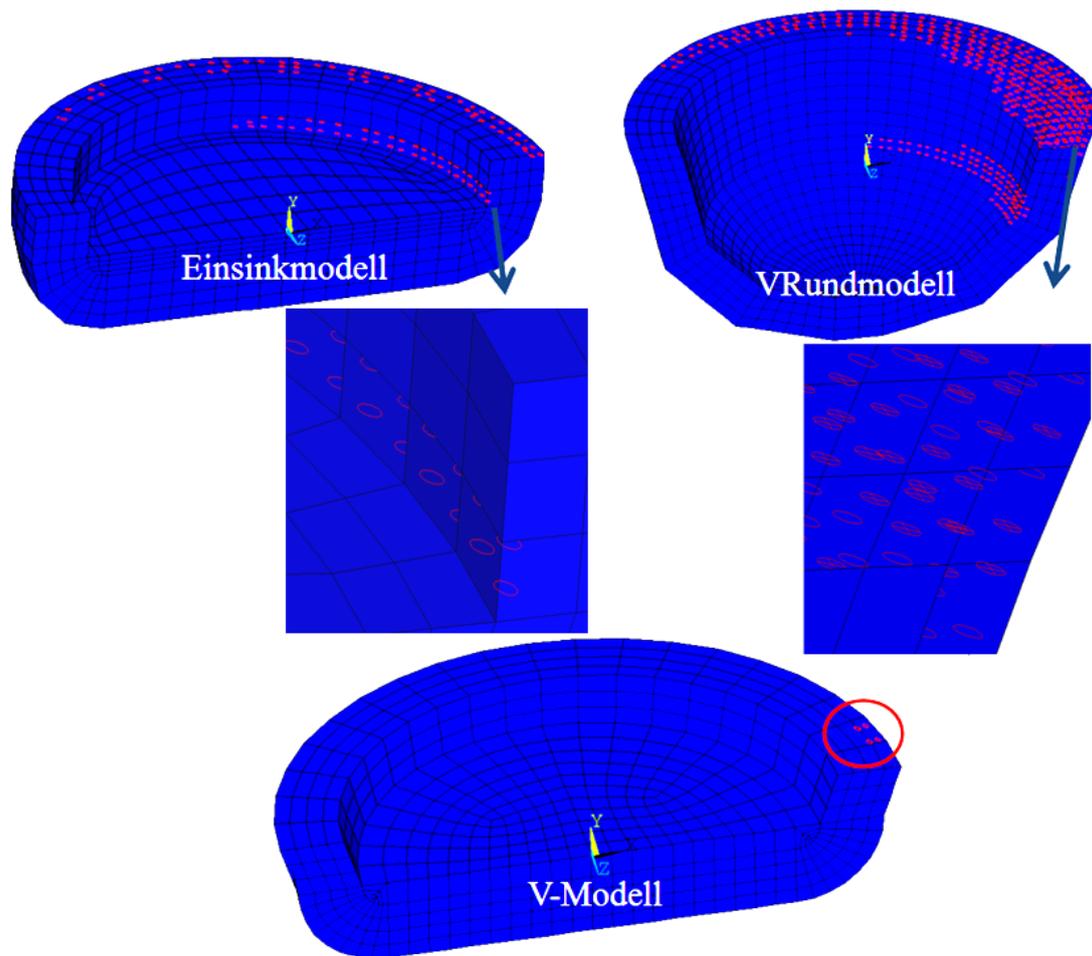


Bild 6.6: Prognose der Rissbildungserscheinung in der Ta-Barriere am Durchkontaktierungsboden.

Gemäß dem Hauptspannungskriterium soll aufgrund der Überschreitung des UTS eine Rissbildung entlang der Ta-Barriere am Boden der Durchkontaktierung und in der Nähe bzw. unterhalb der Deckschicht erscheinen. Die Rissbildung (rot markiert) tritt auf der senkrechten Wirkungsebene zu der Hauptspannung auf. Im Endzustand deuten die Kreise auf offene Risse und die gekreuzten Kreise auf geschlossene Risse hin. Bei dem Einsink- und V-Modell sollen nur offene Risse durch hohen Stress entstehen, während bei dem VRundmodell geschlossene Risse auch vorhanden sind. Die berechnete Rissbildung entlang der Ta-Barriere verstärkt die Annahme, dass am Durchkontaktierungsboden poröse Barrieren entstehen.

6.3 Charakterisierung der Porosität am Durchkontaktierungsboden

Mit Hilfe des Befehls „VSUM“ kann ANSYS® das Volumen einer vorselektierten Struktur ermitteln. Anhand des Befehls „*GET“ ist es möglich, die Information über das Volumen eines Elementes herauszuschreiben. Anschließend kann die Porosität der Ta-Barriere ermittelt werden. Dabei wird die Annahme getroffen, dass ein offener Riss in einem Knoten einem Achtel des Elementvolumens entspricht [29, 40].

Im Weiteren wird die empirisch erhaltene Annäherungsformel $\tau_p = \varepsilon_p^{-0.4}$ (35) für die Bestimmung der Turtuosität verwendet. Unter Turtuosität τ_p versteht man den effektiven zurückgelegten Weg eines Atoms um durch ein Medium durch zu diffundieren, der durch die Dicke des porösen Mediums geteilt wird. In Bild 6.6 ist ersichtlich, dass es sich bei den Modellen um eine Porosität handelt, welche nicht die Hälfte des gesamten betrachteten Volumens (Porosität kleiner als 0.5) übersteigt. So kann man quantitativ die Porosität der Ta-Barriere durch den Porositätsfaktor charakterisieren. In der Tabelle 6.1, 6.2 und 6.3 ist die Ermittlung des Porositätsfaktors bei dem Einsink-, VRund-, und V-Modell zusammenfassend dargestellt.

Porositätscharakterisierung des Einsinkmodells		Bemerkung
Gesamt Volumen Ta-Barriere [μm^3]	5,13E-05	
Gesamte poröse Volumen [μm^3]	4,71E-07	1 Knoten = 1/8 des Elementvolumens
Porosität	9,18E-03	
Turtuosität	6,53E+00	$\tau_p = \varepsilon_p^{-0.4}$
Porositätsfaktor	1,41E-03	

Tab. 6.1: Porositätscharakterisierung der Ta-Barriere des Einsinkmodells am Durchkontaktierungsboden.

Porositätscharakterisierung des VRundmodells		Bemerkung
Gesamt Volumen Ta-Barriere [μm^3]	5,86E-05	
Gesamte poröse Volumen [μm^3]	1,49E-06	1 Knoten = 1/8 des Elementvolumens
Porosität	2,54E-02	
Turtuosität	4,34E+00	$\tau_p = \varepsilon_p^{-0.4}$
Porositätsfaktor	5,86E-03	

Tab. 6.2: Porositätscharakterisierung der Ta-Barriere des VRundmodells am Durchkontaktierungsboden.

Porositätscharakterisierung des V-Modells		Bemerkung
Gesamt Volumen Ta-Barriere [μm^3]	5,24E-05	
Gesamte poröse Volumen [μm^3]	5,27E-08	1 Knoten = 1/8 des Elementvolumens
Porosität	1,01E-03	
Turtuosität	1,58E+01	$\tau_p = \varepsilon_p^{-0.4}$
Porositätsfaktor	6,36E-05	

Tab. 6.3: Porositätscharakterisierung der Ta-Barriere des V-Modells am Durchkontaktierungsboden.

Aus den Tabelle 6.1 bis 6.3 geht hervor, dass das VRundmodell den höchsten Porositätsfaktor von 5.86 E-3 aufweist. Bei dem Einsinkmodell beträgt der Porositätsfaktor 1.41 E-3, dieser Faktor ist im Vergleich zu dem VRundmodell um 75 % kleiner. Bei dem V-Modell liegt der Porositätsfaktor bei 6,36 E-5, dieser Faktor ist im Vergleich zu dem VRundmodell um nahezu eine Größenordnung kleiner. Bei dem bei dem Flachmodell würde sich ein Porositätsfaktor von Null ergeben, sodass laut der Gleichung $D_{\text{Porös}} = (\varepsilon_p / \tau_p) * D$ (34) bei dem Flachmodell keine

Diffusion des Cu durch Ta-Barriere erfolgen kann. Das Flachmodell erwies sich in Bezug auf die Porositätsentstehung als das günstigste Modell. Jedoch stellte man bei dem VRundmodell aus der vorangegangenen Untersuchung fest, dass der hydrostatische Stress und die Stressgradienten bei VRundmodell am Geringsten sind.

Die Rissbildungsvorhersage und die Porositätscharakterisierung wurden unter der SM-Bedingung nicht durchgeführt, da sich bei einer Substrattemperatur von 175° C ein σ_1 in der Ta-Barriere am Durchkontaktierungsboden ergibt, der im Vergleich zu der EM-Bedingung aufgrund der Umstellung des Stresszustandes um ca. 50% kleiner geworden ist. In Bild 6.6 ist die Verteilung der ersten Hauptspannung in Ta-Barriere unter SM-Bedingungen bei den 4-Via-Modellen dargestellt.

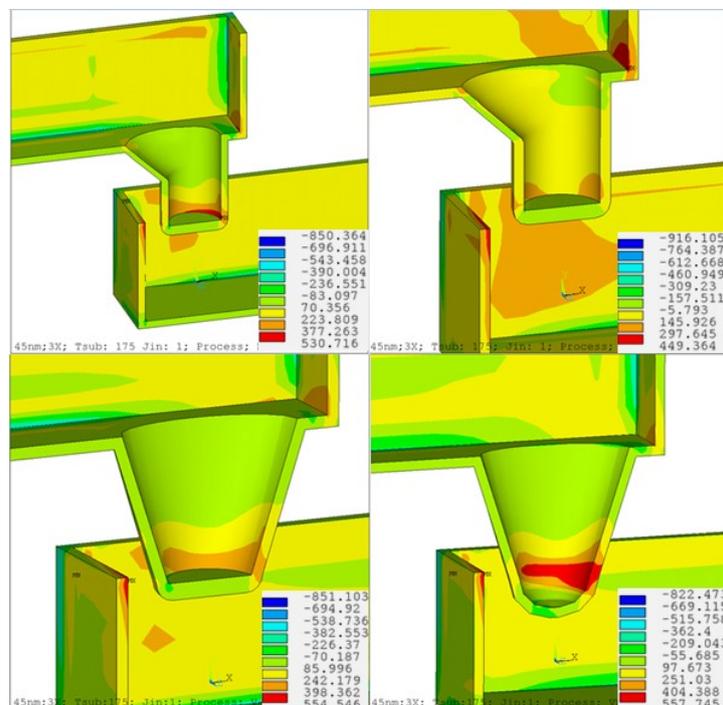


Bild 6.6: σ_1 -Verteilung [MPa] in der Ta-Barriere an 45nm-Modellen bei 175° C.

Der σ_1 -Wert liegt somit weit unterhalb des angesetzten UTS von 900 MPa. Darüber hinaus treten die porösen Barrieren am Boden der Durchkontaktierung bei einem EM-Belastungstest mit einer Temperatur von 325° C auf [7].

6.4 Ausblick auf die Porositätscharakterisierung und Diffusion in poröser Ta-Barriere

Mit Ausblick auf die Ergebnisse der Porositätsuntersuchung ergeben sich folgende mögliche Forschungsaktivitäten. Durch die günstige Schubbelastung bei einer flach angesetzten

Durchkontaktierung auf M1 und die Entlastung der Hauptstannungskomponente durch die V-Geometrie der Durchkontaktierung kann ein V-Flachmodell zukünftig für eine Verbesserung der Porositätseigenschaften in der Ta-Barriere Boden der Durchkontaktierung in Frage kommen.

Die Ta-Barriere induziert hohe Stresswerte am Durchkontaktierungsboden durch das hohe E-Modul und den geringen thermischen Ausdehnungskoeffizienten im Vergleich mit Cu. Deshalb ist ein Durchkontaktierungsboden ohne Diffusionsbarriere gegebenenfalls als Maßnahme gegen den hohen Stress in diesem Bereich vorstellbar. Der Nachteil ist, dass dadurch der Massenfluss in der Leiterbahn ununterbrochen erfolgen und somit weitere Zuverlässigkeitsprobleme der Elektromigration infolge der Massenflussdivergenz verursachen kann.

Zukünftig ist eine Migrationsberechnung des Cu in semi-poröser Ta-Barriere am Durchkontaktierungsboden unter Verwendung der Technik der Submodellierung als Voruntersuchung vorstellbar. Die Diffusionskonstante von Cu in Ta-Schichten wurde in [11] empirisch ermittelt. Die Aktivierungsenergie der Cu-Diffusion in Ta-Matrix wurde durch Simulation und Experimente in [4] ermittelt. Für die Voruntersuchung kann ein angepasster Z^* zuerst angenommen werden, denn Z^* wird sich mit dem Wechsel der Cu-Cu-Umgebungsmatrix zur Cu-Ta-Matrix in Bezug auf das elektrische Feld ändern. Als Richtwert für die Anpassung des Z^* würde das Verhältnis der Aktivierungsenergie der Cu-Diffusion in Ta-Schichten zu der Aktivierungsenergie der Cu-Selbstdiffusion dienen. In der Tabelle 6.4 sind die bekannten Parameter zusammengefasst.

Parameter Cu-Diffusion in Ta-Barriere	Wert	Einheit	Quelle
E_A	0,65 [111]; 5,8 [110]; 2,7 [100]	eV	[4]
D_0	2,87 E-14	cm ² /s	[11]
Ω_{Ta}	1,81 E-29	m ³	Periodensystem [71]
N_{Ta}	5,52 E+28	1/m ³	Periodensystem [71]

Tab. 6.4: Bekannte Parameter für die Berechnung der Cu-Diffusion in einer Ta-Barriere.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Der mechanische Stress kommt hauptsächlich durch die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten der Metallisierungsstruktur bei angelegter Temperatur zustande. Durch die erfolgreiche Einführung des „Birth and Death“ Algorithmus konnte der kumulative Stresseffekt beim Anlegen unterschiedlicher Prozesstemperatur mit simuliert werden. Dadurch erfolgte zum ersten Mal die Stressberechnung infolge der EM- oder SM-Randbedingung unter Berücksichtigung des „Vor-Stress“ aus dem weitgehend berücksichtigten Herstellungsprozess [16]. Die Untersuchung hat gezeigt, dass sich die Metallisierung nach einer Stressberechnung mit Berücksichtigung des Herstellungsprozesses, bei der EM Testtemperaturen, wie erwartet in einem überwiegend kompressiven Stresszustand befindet. An einigen für die Stressmigration empfindlichen Stellen, wie z.B. in der Verrundung der Durchkontaktierung der ersten Metallisierung kann man tensile Stressbereiche erkennen. Bei der Stressberechnung mit einer Referenztemperatur für den stressfreien Zustand hingegen befindet sich die Metallisierung in einem überwiegend tensilen Zustand mit sehr wenig kompressiven Anteilen. Es ist aus diesem Grund notwendig den Herstellungsprozess in den Simulationen mit zu berücksichtigen.

Bislang erfolgte die FE-Betrachtung für die gesamte modellierte Struktur. Aufgrund der Komplexität der Geometrie und dessen Einfluss auf die Stressentwicklung bedarf die Untersuchung einer abgegrenzten Analyse am Boden der Durchkontaktierung mit Hilfe von sogenannten Submodellen. Durch die Submodelltechnik in ANSYS® wird eine genauere Untersuchung der Stressentwicklung mit Interpolation der Randbedingungen aus der Gesamtstruktur ermöglicht. Zum ersten Mal wurde die Submodelltechnik für die Analyse der Stressverteilung in Metallisierungsstrukturen verwendet. Geometrisch kritische Stellen wie z.B. Abrundungen und Ecken konnten durch die erhöhte Anzahl der Knoten genauer modelliert werden. Eine Untersuchung wurde für das Modell des 32nm Technologieknotens durchgeführt, um die Ergebnisse zwischen dem Gesamt- und Submodell zu vergleichen. Man stellte fest, dass die Stressverteilung für beide Modelle örtlich übereinstimmen. Im Bereich des Bodens der Durchkontaktierung erreichen sowohl der VMS als auch der hydrostatischer Stress hohe Werte. Die Übereinstimmung des VMS deutet auf eine genügende Netzfeinheit des Submodells für die Stressbetrachtung hin. Generell sollte bei dem Gesamtmodell auf die Homogenität der Vernetzung geachtet werden. Es ist anzumerken das die Sub-Modelltechnik für die weitere Untersuchung des mechanischen Verhaltens der Barriere sehr gut geeignet ist und die Lösungen im Vergleich zum Gesamtmodell sehr gut übereinstimmen.

Es wurden Durchkontaktierungen von vier unterschiedlichen Geometrien modelliert. Die 4-Via-Modelle wurden mechanisch sowohl durch eine Elektromigrations (EM)- als auch Stressmigrations (SM)-Analyse charakterisiert. Die EM-Charakterisierung führte zu dem Ergebnis, dass durch die Einführung neuer Geometrien die Stressverteilung verbessert werden kann. Das Flachmodell stellte sich in Bezug auf den VMS als die günstigste Variante dar, da es die höchste VMS-Reduktion im Vergleich zu den anderen Modellen mit sich brachte. Hinsichtlich des hydrostatischen Stresses (HS) erwies sich das VRundmodell als die günstigste Variante. Bei der SM-Charakterisierung wurde festgestellt, dass der geometrische Modellierungsansatz bei dem V- und VRundmodell Vorteile hinsichtlich der hydrostatischen Stressverteilung in der Metallisierung brachte. Der tensile hydrostatische Stress (HS) war im VRundmodell am geringsten. Das erzielte HS-Reduktionsverhältnis vom VRundmodell war am Höchsten im Vergleich zu allen anderen Modellen. Die V-Geometrie stellte sich hinsichtlich der Verteilung der Stressgradienten als am besten geeignet heraus. Die Stressgradienten waren im VRundmodell am geringsten. Somit ergibt sich das Flach- und VRundmodell als die günstigsten Modelle aus der mechanischen Spannungsanalyse.

Weiter wurden die Parametereinflüsse auf die Zuverlässigkeitsaspekte der Metallisierungsstruktur untersucht. Aus der Untersuchung der Barrierenschichtdicke resultierte, dass die höchsten Massenflüsse an den Durchkontaktierungskanten auftraten. Die Wahl einer dickeren Barrierenschicht reduziert den Massenfluss, sowohl in Bezug auf die Elektro- als auch in Bezug auf die Stressmigration, dies gilt unabhängig von der gewählten Technologiegröße oder der gewählten Ausführung der Durchkontaktierung. Eine dickere Barriere führt jedoch auch zu einem höheren Leitbahnwiderstand und einer entsprechend vergrößerten RC-Verzögerung. Im V-Modell wurden für alle gewählten Technologiegrößen und Barrieredicken geringere Massenflüsse durch Elektro- und Stressmigration festgestellt als im Einsinkmodell. Es besteht daher die Möglichkeit, dass die Wahl der V-Form für Durchkontaktierungen eine höhere Zuverlässigkeit ermöglicht als eine Einsink-Durchkontaktierung.

Bei der Untersuchung der Deckschichtdicke stellte sich heraus, dass die Dicke der SiCN-Schicht keinen Einfluss auf die Änderung der Stromdichte und Temperaturerhöhung in der Metallisierung hat. Die Änderungen der maximalen Massenflussbeträge durch EM sind somit vernachlässigbar. Des Weiteren entwickelte sich im Allgemeinen der Stress in der Metallisierung durch eine dickere Deckschicht schlechter. Durch eine dickere Deckschicht hat man die Bereiche mit einem höheren E-Modul und mit CTE-Unterschieden in der Metallisierung vergrößert und somit Nachteile für die Entwicklung des Massenflusses durch

SM in der Metallisierung gebracht. Diese Aussage resultiert ebenfalls aus der näheren Betrachtung der jeweiligen Referenzpunkte.

Aus der Untersuchung unterschiedlicher Deckschichtmaterialien geht hervor, dass diese auf die Stromdichte, die Temperaturverteilung und somit auf den Massenfluss durch EM in der Cu-Metallisierung keinen nennenswerten Einfluss nimmt. Dieser Fall gilt für alle betrachteten Via-Modelle. Jedoch stellte man fest, dass die Verwendung der SiN-Schicht bzw. eines festeren Materials als mit einer niedrigeren CTE als SiCN überwiegend Vorteile für die Stressentwicklung in der Metallisierung bringt. Bei der Untersuchung unterschiedlicher Dielektrika stellte man fest, dass sich der Stress in der Metallisierung durch die Verwendung unterschiedlicher Dielektrika mit anderen E-Moduln jedoch demselben oder einem höheren thermischen Ausdehnungskoeffizienten wie SiCOH besser entwickeln. Dadurch reduzieren sich die Massenflüsse durch SM in der Metallisierung.

Erstmalig wurde eine Untersuchung zur Rissbildung in Ta-Barriere durchgeführt. Ziel der Untersuchungen war die quantitative Charakterisierung der Porosität im Hinblick auf die unterschiedliche Geometrien der Durchkontaktierung. Aus der Untersuchung resultierte, dass sich das Hauptspannungskriterium als ein geeigneter Ansatz darstellt. Es besagt, dass wenn eine der Hauptspannungen (σ_1 , σ_2 , σ_3) größer oder gleich der Zugfestigkeit eines Materials ist, so müssen die ersten Risse entstehen. Gemäß dem Hauptspannungskriterium soll eine Rissbildung entlang der Ta-Barriere am Boden der Durchkontaktierung und unterhalb der Deck-Schicht erscheinen. Bei dem Flachmodell hingegen wurde keine Rissbildung erwartet, da die Durchkontaktierung direkt auf der unteren Leiterbahn sitzt und somit die Ta-Barriere am Boden mechanisch entlastet ist. Die berechnete Rissbildung entlang der Ta-Barriere verstärkt den Ansatz, dass am Boden der Durchkontaktierung poröse Barrieren entstehen. Anschließend wurde die Porosität und das poröse Volumen in Bezug auf das gesamte betrachtete Volumen für die unterschiedlichen verankerten Geometrien der Durchkontaktierung ermittelt. Die geringste Porosität wurde bei dem VModell festgestellt. Aus der Untersuchung ergibt sich das VModell als das günstigste Modell hinsichtlich der Porositätsentstehung. Durch die geringe Schubbelastung bei einer flach angesetzten Durchkontaktierung auf M1 und die Entlastung der Hauptspannungskomponente durch die V-Geometrie der Durchkontaktierung kann ein V-Flachmodell zukünftig für eine Verbesserung der Porositätseigenschaften in der Ta-Barriere Boden der Durchkontaktierung in Frage kommen.

Aus der Analyse resultierte, dass die Ta-Barriere durch das hohe E-Modul und geringe thermische Ausdehnungskoeffizienten im Vergleich zu Cu hohe Stresswerte am Boden der Durchkontaktierung induziert. Mit Ausblick auf die Ergebnisse ist ein Boden der Durchkontaktierung ohne Diffusionsbarriere gegebenenfalls als Maßnahme gegen den hohen Stress in diesem Bereich vorstellbar.

Künftig ist eine Migrationsberechnung des Cu in semi-poröser Ta-Barriere am Boden der Durchkontaktierung unter Verwendung der Technik der Submodellierung als Voruntersuchung vorstellbar. Die Diffusionskonstante von Cu in Ta-Schichten wurde in [11] empirisch ermittelt. Die Aktivierungsenergie der Cu-Diffusion in Ta-Matrix wurde durch Simulation und Experimente in [4] ermittelt. Für die Voruntersuchung kann ein angepasster Z^* zuerst angenommen werden, denn Z^* wird sich mit dem Wechsel der Cu-Cu-Umgebungsmatrix zur Cu-Ta-Matrix in Bezug auf das elektrische Feld ändern. Als Richtwert für die Anpassung des Z^* würde das Verhältnis der Aktivierungsenergie der Cu-Diffusion in Ta-Schichten zu der Aktivierungsenergie der Cu-Selbstdiffusion dienen.

Eine weitere Maßnahme gegen die Kupferdiffusion kann auch die Verwendung einer dreischichtigen Ta/TaN-Ta-Barriere sein. Die Voruntersuchungen wurden in [19] im Juli 2010 berichtet und seit 2009 durchgeführt. Aus einer atomaren Simulation in [4] resultierte, dass durch die Präsenz von N in TaN der Widerstand zur Diffusion erhöht wurde und die Stapelung von Ta auf TaN die Leistung der Diffusionsbarriere verbessert wurde. In allen Kristallorientierungen besitzt eine TaN-Schicht eine fast doppelt so große Aktivierungsenergie der Cu-Diffusion gegenüber der Ta-Schicht. Jedoch weist die Ta-Schicht eine höhere Aktivierungsenergie der Leerstellenbildung auf und haftet besser an Cu als die TaN-Schicht. Die Begründung für die Verwendung der dreischichtigen Barriere liegt darin, dass man den Widerstand der Metallisierungsstruktur zur Diffusion erhöhen möchte [19]. Dadurch kann das Zuverlässigkeitsverhalten in Bezug auf Elektromigration verbessert und eine gute Haftung der Diffusionsbarriere am Boden der Durchkontaktierung gewährleistet werden.

Zukünftig kann die Verwendung der Cu-Legierungen aus Cu und Al für die Metallisierung vorstellbar sein. In [55] wurde im Jahre 2006 empirisch bewiesen, dass CuAl als Material für Metallisierungsstrukturen geeignet sein kann.

8 Literaturverzeichnis

1. H.B. Ghavifekr, Dissertation: "Einsatz bruchmechanischer Integralkonzepte zur thermomechanischen Zuverlässigkeitsbewertung in der mikroelektronischen Aufbau- und Verbindungstechnik", Fakultät IV –Elektrotechnik und Informatik- der TU Berlin, 2004.
2. Z.Y. Wu, Y.T Yang, C.C. Chai et. al.: „Structure-dependent behaviour of stress-induced voiding in Cu interconnects“, *Thin Solid Films*, Vol. 518, Januar 2010, pp. 3778-3781.
3. J.-Y. Kim, D. Jang, J.R. Greer: "Tensile and compressive behaviour of tungsten, molybdenum, tantalum and niobium at the nanoscale", *Acta Mater*, Vol. 58, 2010, pp. 2355-2363.
4. Y. Zhao, G. Lu: "First-principles simulations of copper diffusion in tantalum and tantalum nitride", *The American Physical Society, Physical Review B* 79, 214104, Juni 2009
5. R. Kniep, G. Kreiner: "Definitionen für Fachbegriffe im Bereich der Diffusion im festen Zustand (IUPAC-Empfehlungen 1999)", *Angewandte Chemie*, Vol. 114, 2002, pp. 4765-4776
6. K. Weide-Zaage, J. Ciptokusumo, O. Aubel: „ Influence of the Activation Energy of the Different Migration Effects on Failure Locations in Metallizations“, *Workshop on Stress-Induced Phenomena in Metallization*, Bad Schandau, April 2010.
7. O. Aubel, S. Thierbach, F. Koschinsky, et. al.: 'Investigation of via Bottom Barrier Integrity Impact on Electromigration', *IEEE IRPS*, 2007, pp. 648-649.
8. A.H. Fischer., O. Aubel, et.al.: "Reliability Challenges in Copper Metallizations arising with the PVD Resputter Liner Engineering for 65nm and beyond", *IEEE IRPS*, 2007.
9. S.Penka, S.Schulte, M. Czekalla, et. al.: 'How to improve intrinsic and extrinsic reliability of vias by process optimization', *Microelectronic Engineering*, Vol. 85, Oktober 2008, pp. 2123-2127.
10. A.H. Fischer, A. von Glasow: 'Electromigration and Stressmigration Failure Mechanism Studies in Copper Interconnects', *SEMICON* 2002.
11. S.W. Loh, D.H. Zhang, C.Y. Li et. al.: "Study of copper diffusion into Ta and TaN barrier materials for MOS devices", *Thin Solid Films* 462-463, 2004, pp. 240-244.
12. J.D. Torre, G.H. Gilmer, D.L. Windt, et. al.: "Monte Carlo Modeling of Thin Film Deposition: Influence of Grain Boundaries on the Porosity of Barrier Layer Films"
13. J.R. Lloyd, C.E. Murray, T.M. Shaw et. al.: "Theory for Electromigration Failure in Cu Conductor", *8th International Workshop on Stress Induced Phenomena in Metallization*, AIP Conference Proceedings, Vol. 817, 2006, pp. 23-33.
14. A. Heryanto, K.L. Pey, Y.K. Lim et. al.: "Study of Stress Migration and Electromigration Interaction in Copper/Low-k Interconnects", *IEEE IRPS*, 2010, pp. 586-590.

15. Y.X. Zhang, L. Liang: "Electromigration modeling with consideration of hillock formation", IEEE EuroSimE, 2010.
16. K. Weide-Zaage, J. Zhao, J. Ciptokusumo, et.al: "Determination of migration effects in Cu-via structures with respect to process-induced stress", ESREF, 48, No. 8-9, 2008, pp.1393-1397.
17. W. Li, C.M. Tan, N. Raghavan: "Dynamic simulation of void nucleation during electromigration in narrow integrated circuit interconnects", Journal of Applied Physics, Vol. 105, 014305, 2009.
18. Y.K. Lim, R. Arijit, K.L. Pey, et al.: "Stress migration reliability of wide Cu interconnects with gouging vias", IEEE IRPS, 2005, pp. 203–208.
19. F.X. Deng et. al. : "Advanced Direct Contact Via (DCV) Process with Ta/TaN/Ta Tri Layer, IEEE IPFA, 2010
20. K. Weide-Zaage, D. Dalleau, X. Yu: "Static and dynamic analysis of failure locations and void formation in interconnects due to the various migration mechanisms", Materials Science in Semi-conductor Processing 6, 2003, pp 85-92.
21. K. Weide-Zaage, F. Kashanchi, O. Aubel, 'Simulation of migration effects in nanoscaled copper metallizations', Microelec. Reliab., 48, Issues 8-9, September 2008, pp. 1398-1402.
22. A. von Glasow, Dissertation: "Zuverlässigkeitsaspekte von Kupfermetallisierungen in Integrierten Schaltungen", Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik der TU München, 2005.
23. Robert B. Ross, 'Metallic Materials Specification Handbook', Chapman & Hall, London, 1992
24. Willam, K. J., and Warnke, E. D., "Constitutive Model for the Triaxial Behavior of Concrete", Proceedings, International Association for Bridge and Structural Engineering, Vol. 19, ISMES, Bergamo, Italy, p. 174 (1975).
25. J. Ciptokusumo, K. Weide-Zaage, O. Aubel: "Investigation of stress distribution in via bottom of Cu-via structures with different via form by means of submodeling", Microelectronics Reliability Vol. 49, September 2009, pp. 1090-1095.
26. J. Ciptokusumo, K. Weide-Zaage, O. Aubel: "Principles for Simulation of Barrier Cracking due to high Stress", IEEE EuroSimE, 2010.
27. J. Ciptokusumo, K. Weide-Zaage, O. Aubel: "Mechanical Characterization of Copper based Metallizations with different Via-Bottom Geometries", IEEE IPFA, 2010.
28. K. Weide, Dissertation: "Untersuchungen von Stromdichte-, Temperatur- und Massenflussverteilung in Viastrukturen integrierter Schaltungen", Düsseldorf, VDI-Verlag, 1994.

29. U. Stelzmann, C. Groth, G. Müller: „FEM für Praktiker Band 2: Strukturdynamik“, Expert-Verlag, 5. Auflage 2008
30. A. Baar, Dissertation: “Modellierung der Werkstoffeigenschaften von Papierfaserprodukten als Grundlage für deren konstruktive Gestaltung”, Fakultät Maschinenbau, Universität Dortmund, 2005.
31. Theo Pintat, “Werkstoff-Tabellen der Metalle“, Kröner, Stuttgart, 2000.
32. Hugh Baker, “Properties and Selection: Nonferrous Alloys and Special-Purpose Materials”, ASM International, Ohio, 1979.
33. N. Kamsah, T.S. Gross, I.I. Tsukrov: “Finite Element Predictions of the Effect of Diffusion-Accommodated Interfacial Sliding on Thermal Stresses in Cu/Polymer Dielectric and Cu/Oxide Dielectric Single Level Damascene Interconnect Structures”, Journal of electronic packaging, Vol. 124, 2002, pp. 12-21.
34. S.P. Hau-Riege, C.V. Thompson: “The effects of the mechanical properties of the confinement material on electromigration in metallic interconnects”, Journal of material research, Vol. 15, 2000, pp. 1797-1802.
35. M. Lane, R.H. Dauskardt: “Plasticity contributions to interface adhesion in thin-film Interconnect structures”, Journal of material research, Vol. 15, 2000, pp. 2758-2769.
36. G. Bernauer, W. Brocks, U. Mühlich, et.al: “Hinweise zur Anwendung des GURSON-TVERGAARD-NEEDLEMAN-Modells“, Institut für Werkstoffforschung GKSS, Dezember 1999.
37. A. Needleman, V. Tvergaard, J.W. Hutchinson: “Void Growth in Plastic Solids”, www.seas.harvard.edu/hutchinson/papers/450.pdf.
38. M. Springmann, M. Kuna, “Identification of material parameters of GURSON-TVERGAARD-NEEDLEMAN model by combined experimental and numerical techniques”, Computational Material Science Vol. 32, 2005, pp. 544-552.
39. A.A. Shapiro: “Chapter 9: Diffusion in Multicomponent Mixtures”, “Computer aided property estimation for process and product design”, Elsevier B.V., 2004.
40. ANSYS®, Inc., multiphysics, ANSYS, Inc. Sourthpointe, Canonsburg (PA), USA
41. H. Brocke, Dissertation: “Finite-Elemente-Analyse von modernen Leitbahnsystemen”, Fakultät Elektrotechnik und Informationstechnik der Universität Hannover, Fraunhofer IRB Verlag, 2004.
42. M. Gotuaco, P.W. Lee, et. al.: “The case for CVD Low-k Technology” Semiconductorfabtech, Vol. 15, Sec. 6 “Wafer Processing”, 2001, pp.179-183.
43. G. Wang, S. Groothuis, P.S. Ho: “Effect of Packaging on Interfacial Cracking in Cu/Low k Damas-cene Structures”, Proc. Conf. IEEE/ECTC, 2003, pp. 727-732.

44. H. Landhold, R. Börnstein: „Self-diffusion in solid metallic elements and in aluminum group metals, Mat. Properties, New Series III/26, J. Springer Verlag Berlin.
45. A.N. Saxena, M.A. Bourgeois: “Thermal Conductivity of Thin Dielectric Films and its Impact on Multilevel Metallizations”, Proc. Conf. IEEE/VMIC, 1993, pp.251-157.
46. H. Weaver: “Elektro- und Thermotransport in Metallen”, J.A. Barth Leipzig 1973.
47. J.J. Waeterloos, J.H. Struyfield: “Integration feasibility of Porous SiLk Semiconductor Dielectric”, Proc. IEEE Interconnect Technology Conference, 2001, p 253-254.
48. W.-F. Yau, Y.-C. Lu, et. al.: “Black diamond - a low k dielectric for cu damascene applications”, AMC 1999, MRS, p. 379-386.
49. S.J. Martin, J.P. Godschalk, et. al.: “Development of a Low-Dielectric Constant Polymer for the Fabrication of Integrated Circuit Interconnect“, Advanced Materials, Volume 12 Issue 23, pp.1769-1778.
50. International Technology Roadmap for Semiconductors 2007 Edition, Internet: www.itrs.net/links/2007itrs/2007_chapters/2007_ERD.pdf
51. L.Y. Chan, B. Andrawes: “Characterization of the uncertainties in the constitutive behavior of carbon nanotube/cement composites”, Science and Technology of Advanced Materials, Vol. 10, 2009, 045007.
52. R. Delsol, J.-P. Jacquemin, M. Gregoire, et. al.: “Improved electrical and reliability performance of 65 nm interconnects with new barrier integration schemes”, Microelectronic Engineering 83 (2006) pp. 2377–2380.
53. Ki-Don Lee, Young-Joon Park, Tae Kim: „Via Processing Effects on Electromigration in 65nm Technology, IEEE/IRPS, 2006, pp.:103-106.
54. J. Gambino, C. Johnson, et. al.: “ Stress Migration Lifetime for Cu Interconnects with CoWP-only Cap”, Proc. IPFA, 2005, pp.92-95.
55. K. Barmak, C. Cabral Jr., K.P Rodbell, et. al.:”On the use of alloying elements for Cu interconnect application”, Journal of Vacuum Science & Technology B, Vol. 24(6), 2006.
56. S. Yokogawa, H. Tsuchiya: “Effects of Al Doping on Electromigration Performance of Narrow Single Damascene Cu Interconnects”, IEEE 06CH37728, 44th Annual International Reliability Physics Symposium, 2006
57. T. Heumann: „Diffusion in Metallen, Grundlagen, Theorie, Vorgänge in Reinmetallen und Legierungen“, Springer Verlag, Berlin, 1992.
58. D. Gross, Th. Seelig: „Bruchmechanik mit einer Einführung in die Mikromechanik“, 3. Auflage, Springer Verlag, Berlin, 2001.
59. M. Kuna: „Numerische Beanspruchungsanalyse von Rissen, Finite Elemente in der Bruchmechanik“, Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, 2008.

60. V. Sukharev, E. Zschech, W.D. Nix : "A Model for electromigration induced degradation mechanisms in dual- inlaid copper interconnects: Effect of microstructure", Journal of Applied Physics, Vol.102, 2007.
61. Huang, J.J.; Tsai, M.; Shue, S.; Su, H.; Ko, T.: "Damascene Interconnect structure with Cap Layer", United States Patent Application Publication, Pub. No.: US 2006/0118962 A1, 2006.
62. K. Weide-Zaage, Habilitationsschrift: "Simulation von Ausfallmechanismen auf Package- und Chiplevel", Leibniz Universität Hannover, Mai, 2010.
63. S. Orain, J.C. Barbe, X. Federspiel, et.al. : "FEM-based Method to Determine Mechanical Stress Evolution During Process Flow in Microelectronics. Application to stress-voiding"
64. M.K. Mazumder et.al.
65. I.A. Blech: "Electromigration in thin Aluminium Films on Titaniumnitrid", Journal of Applied Physics, Vol. 47 (No. 4), S.1203- 1208, 1976.
66. W.C. Baek, et.al. : "Stressmigration studies on dual damascene Cu/oxide and Cu/low k interconnects", Workshop on Stress-Induced Phenomena in Metallization. AIP Conference Proceedings, 2004, pp. 249-255.
67. H. Dannbauer, W. Eichlseder, B. Unger: "Neue Aspekte der Submodelltechnik in der Finite Elemente Methode zur Beschleunigung des Entwicklungsprozesses", FEM Kongress, Baden Baden, 1998.
68. O. Aubel, S. Thierbach, R. Seidel, et. al. : „ Comprehensive reliability analysis of CoWP Metal Cap unit processes for high volume production in sub- μm dimensions", IEEE IRPS, 2008, pp. 675-676.
69. M. Gosz, A. F. Okyar: "Effect of diffusionally accommodated interfacial sliding on the stress and deformation in copper/polyimide high density interconnects", Mechanics of Materials 31, 1999, pp. 317-329.
70. Y. Hou, C.M. Tan: "Comparison of stress-induced voiding phenomena in copper line-via structures with different dielectric materials", Semiconductor Science and Technology, Vol 24, 2009, 085014 (8pp).
71. C.E. Mortimer, U. Müller: „Chemie : das Basiswissen der Chemie“, 10. Auflage, Thieme, Stuttgart, 2010.

DANKSAGUNG

Zuerst bedanke ich mich bei meinem Doktorvater Professor Osten, dass er bereit ist, diese Arbeit zu begleiten, die Prüfungen und die Promotion zu ermöglichen. Ich danke auch Professor Fissel und Professor Nacke für die Bereitschaft als dritter Referent und Vorsitz zu sein.

Mein besonderer Dank gilt für Frau PD Dr.-Ing. Kirsten Weide-Zaage, dass sie mich als wissenschaftlicher Mitarbeiter eingestellt hat, mir den Wissenshorizont durch konstruktive Diskussionen erweiterte und mir jederzeit mit Rat und Tat zur Seite stand. Die Möglichkeit Ihr zu unterstellen erfüllte meine Zeiten bei LFI mit Freude und Motivation. Die Erfahrung nach ca. 10 Jahren ein wissenschaftlicher Talk wieder auf Englisch zu halten werde ich nie vergessen.

Meinem Arbeitskollegen Herrn Dipl.-Ing Lutz Meinshausen danke ich für die frische Gesellschaft, Lockerheit, aber auch wertvolle wissenschaftliche Diskussionen, die er während der Arbeitszeit immer mitbrachte. Ich wünsche Ihm, dass er stets die Möglichkeit bekommt, die Wissenschaft auf der Welt voranzutreiben.

Ich danke Herrn Lissel, der mir ständig bereit ist zu helfen, wenn die Rechner rebellieren. Vor Ihm hat jeder Rechner Angst. Außerdem bedanke ich mich bei allen Kollegen von LFI sowie MBE, auch bei meinen Freunden und ehemaligen Studenten.

Ich danke meinen Eltern, dass sie ständig für mich beten, ich bete auch für sie zurück.

Zuletzt bin ich Dankbar bei meiner Frau, Dipl.-Ing (FH) Rizky Mira Harini, meinen Kindern, Luqman Daffa und Syamil Dermawan, für unsere ewige Liebe.