

Приравняв Q к пределу прочности на разрыв, находим максимально допустимую радиальную деформацию для данного типа ленты.

Если расчет радиальной деформации производится при степенном законе упрочнения материала, то в области степенного упрочнения

$$\epsilon_r = \frac{\sigma_{iT}}{2E} \sqrt[m]{\frac{Q}{\sigma_T}}, \quad (8)$$

где E — модуль упругости первого рода, а m — показатель степени функции упрочнения.

На площадке текучести при постоянной нагрузке интенсивность деформаций растет до значения $\epsilon_i = \epsilon_T^*$, которое известно из диаграммы растяжения. Следовательно, $\epsilon_i = \epsilon_T^* = 2\epsilon_r$, откуда $\epsilon_r = \epsilon_T^*/2$.

По окончании площадки текучести расчет следует вести по формулам (7) или (8) в зависимости от характера упрочнения материала.

ВЫВОДЫ

При любом законе упрочнения адгезионных лент расстояние между кристаллами пропорционально их размерам и радиальной деформации, для расчета которой получены уравнения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Биргер И.А. Круглые пластинки и оболочки вращения. — М.: Оборонгиз, 1961. — 368 с.
2. Малинин Н.Н. Прикладная теория пластичности и ползучести: Изд. 2-е, перераб. и доп. — М.: Машиностроение, 1975. — 400 с.
3. Работнов Ю.Н. Механика деформируемого твердого тела. — М.: Наука, 1979. — 744 с.

Статья поступила
25 октября 1983г.

В.Ф.Синкевич, В.Н.Соловьев,
Г.А.Дядина

ВЛИЯНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК МЕТАЛЛИЗАЦИИ НА ПРОЦЕСС ЭЛЕКТРОДИФФУЗИИ

На основе теории протекания в неупорядоченных средах получены аналитические выражения, определяющие зависимость энергии активации электродиффузионных отказов от структуры тонкопленочной металлизации. Результаты теоретического анализа позволяют объяснить многие экспериментальные данные.

Одним из наиболее распространенных отказов в мощных приборах являются отказы металлизации, вызванные электродиффузией ионов металла [1]. Трудности повышения надежности приборов связаны с неизученностью физических механизмов и основных факторов, контролирующих процессы переноса массы в поликристаллических материалах и условия возникновения электродиффузионных разрушений. К настоящему времени экспериментально установлено [1-4], что кинетику развития электродиффузионных отказов определяет в основном микроструктура поликристаллических пленок металлизации. Выявлено [2], что каналом массопереноса в поликристаллах являются границы зерен. К сожалению, адекватной модели границ зерен пока не существует, поэтому интерпретация многочисленных экспериментов по электродиффузии не всегда возможна. Кроме того, экспериментальные методы определения параметров микроструктуры пленок и процесса переноса основаны на различных предположениях [3] и получаемые результаты трудно сравнивать. Теоретические результаты о влиянии микроструктуры пленок на развитие электродиффузионных отказов были получены на основе имитационного и физико-статического моделирования отказов на ЭВМ [5,6].

В настоящей работе предпринята попытка построить аналитическую модель, учитывающую влияние микроструктуры

металлизации на условия развития электродиффузионных отказов.

Причины электродиффузионных отказов. При возникновении электродиффузионных нарушений должны быть причины, по которым дивергенция потока диффундирующих ионов отличается от нуля.

Рассмотрим уравнение непрерывности, в котором учтен перенос только по границам зерен [2]:

$$\left(\frac{dN_b}{dt}\right) = -\nabla I_b + \frac{(N_b - N_b^0)}{\tau}, \quad (1)$$

где τ - среднее время жизни подвижного дефекта на границах зерен; N_b и N_b^0 - мгновенная и равновесная концентрация дефектов на этих границах; I_b - поток атомов по границам зерен; t - время. Собственно, нижним индексом b отмечены параметры границ зерен. Из (1) следует, что локальная концентрация дефектов зависит от дивергенции потока и времени жизни дефектов. Стационарное состояние, соответствующее условию $dN_b/dt = 0$, наступает, когда перенасыщение дефектами становится пропорциональным дивергенции потока.

В поликристаллических идеально текстурированных пленках поток I_b выражается формулой [3,4]:

$$I_b = N_b \frac{\delta D_b}{d} \frac{z_b^*}{kT} eE, \quad (2)$$

где δ - эффективная ширина границы зерен; D_b - коэффициент диффузии ионов по границам зерен; d - средний диаметр зерна; $z_b^* e$ - эффективный заряд увлечения ионов электронами; k - постоянная Больцмана; T - абсолютная температура; e - заряд электрона; E - напряженность поля.

Если включить в (2) диффузионный член, пропорциональный градиенту концентрации, то

$$I_b = \frac{\delta D_b}{d} \left(-\nabla N_b + \frac{N_b}{kT} z_b^* eE \right).$$

Тогда дивергенция этого потока такова:

$$\nabla I_b = \frac{\delta D_b}{d} \left[-\nabla^2 N_b + \frac{N_b}{kT} z_b^* eE \left(\frac{\nabla N_b}{N_b} + \frac{\nabla z_b^*}{z_b^*} - \frac{\nabla T}{T} \right) \right] + \left(\frac{\nabla D_b}{D_b} - \frac{\nabla d}{d} \right) I_b. \quad (3)$$

При этом время до возникновения электродиффузионного отказа тонкопленочного проводника t_H определяется выражением [5,6]

$$t_H \sim (\nabla I_b)^{-1}. \quad (4)$$

Видно, что нарушения непрерывности потока атомов I_b могут быть вызваны многими причинами. Как показано в [6], доминирующее влияние на условия возникновения электродиффузионных отказов различных полупроводниковых приборов оказывают макроскопические градиенты температуры, состава пленки и т.д. В то же время кинетика развития отказов (формирования пустот в области макроскопических градиентов) определяется микроструктурой пленки [5,6]. Причем микроструктура пленки независимо от того, каким из макроскопических факторов обусловлена неоднородность потока атомов, влияет на коэффициент диффузии ионов по границам зерен D_b , значение ∇I_b и t_H , см. (3) и (4). Поэтому анализ влияния микроструктуры на коэффициент диффузии D_b и условия электродиффузионного переноса атомов в тонких пленках представляет большой интерес.

Особенности электродиффузии атомов в неупорядоченных средах. Основной отличительной чертой неупорядоченной структуры является случайный характер потенциального рельефа $E(\vec{r})$, где \vec{r} - направление переноса вещества для миграции ионов (рис.1). Тонкие пленки металлизации в большинстве случаев имеют разупорядоченную поликристаллическую структуру, что приводит к модификации процесса переноса ионов по сравнению с более изученными кристаллами.

Исследуемую пленку можно представить в виде ряда элементарных участ-

ков длиной, равной среднему диаметру зерна \bar{d} (рис. 2). В каждом из этих участков имеется некоторое случайное число межзеренных границ, вдоль которых происходит перенос вещества. Причем коэффициент диффузии вдоль j -й границы определяется выражением [5, 6]:

$$D_{\text{эф}j} = D_0 \sin(\theta_j/2) \exp[-E_a(\theta_j)/kT],$$

где D_0 - постоянный коэффициент; θ_j - угол разориентации между смежными зернами; $E_a(\theta_j)$ - энергия активации процесса электродиффузии вдоль j -й границы. Таким образом поликристаллическая пленка металлизации представляет собой сетку взаимосвязанных границ зерен, энергия активации процесса электродиффузии вдоль которых есть случайная величина. Функция распределения энергии активации $F(E_a)$ определяется микроструктурой пленки (точнее, функцией распределения угла разориентации θ и зависимостью $E_a(\theta_j)$). В этом случае протекание ионного тока связано с образованием некоторой области "эффективных" барьеров, понижающей весь образец. Энергию активации электродиффузионных отказов и ее связь с микроструктурой пленки металлизации можно определить методами теории протекания [7, 8].

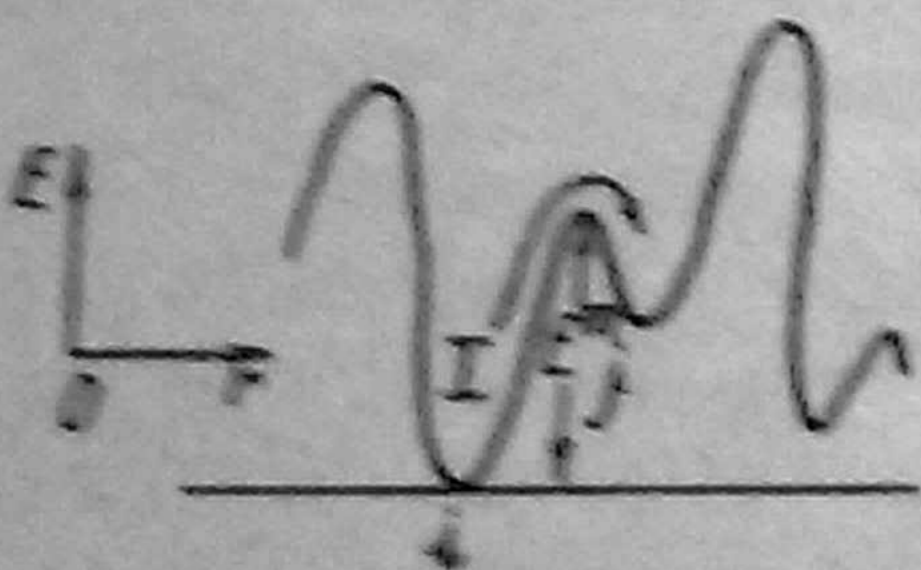
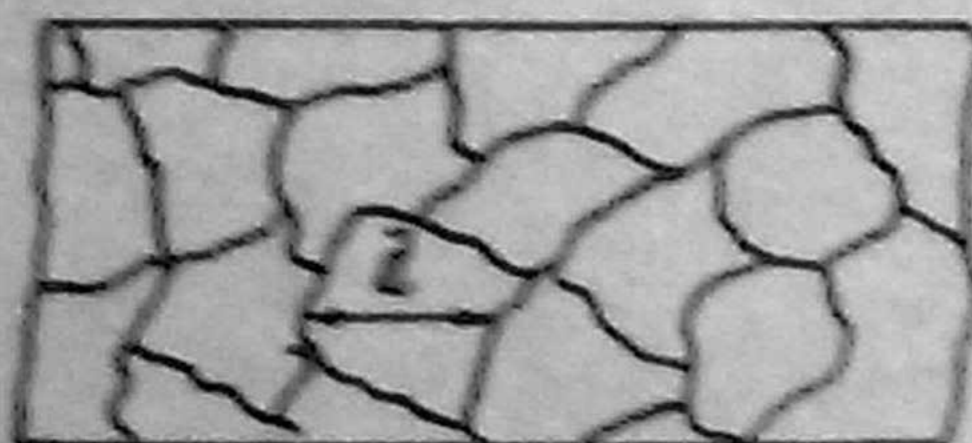


Рис. 1. Профиль кривой потенциальной энергии в неупорядоченной системе. Указано направление "перескока" иона i из состояния i в j . E^m - случайный барьер

Рис. 2. Фрагмент поликристаллической пленки



Согласно теории протекания эффективное значение энергии активации $E_{a\text{эф}}$, характеризующее интегральный пе-

ренос вещества в сильно неоднородной среде, определяется уровнем протекания E_{Π} . Он представляет собой минимальную энергию, которую должен иметь диффундирующий атом для классического движения в пространстве с профилем потенциальной энергии $E(x)$. В рассматриваемом случае для уровня протекания справедливо соотношение

$$E_{a\text{эф}} = E_{\Pi} = \bar{E}_a - m\sigma_E, \quad (5)$$

где \bar{E}_a - среднее значение энергии активации электродиффузии; σ_E - дисперсия распределения по барьерам; m - константа, зависящая от функции распределения $F(E_a)$. Значения константы m рассчитаны для некоторых функций распределения в двумерной (\bar{m}_B) и трехмерной (\bar{m}_V) системах:

Распределение:	\bar{m}_B	\bar{m}_V
нормальное.....	0,13	1,04
равномерное.....	0,17	1,47
экспоненциальное.....	0,40	0,84

С учетом изложенных результатов суммарный поток вещества, переносимого в процессе электродиффузии вдоль поликристаллического полупроводника с определенной микроструктурой и геометрией, можно представить уравнением:

$$\Phi = \sum_{j=1}^n I_{Bj} \sim j D_{\text{эф}} \exp(-E_{\Pi}/kT) Z_B^{\frac{x}{d}} e/kT, \quad (6)$$

где $D_{\text{эф}}$ - эффективное значение предэкспоненциального множителя; j - плотность тока, протекающего через поперечное сечение пленки металла. Используя (6), можно легко найти дивергенцию суммарного потока вещества $\nabla\Phi$ при наличии макроскопических градиентов температуры, состава пленки и других градиентов и получить выражение для t_H , аналогичное (3) и (4). При этом зависимость E_{Π} от функции $F(E_a)$ отражает влияние микроструктуры пленки на время t_H .

Из (5) следует, что с увеличением степени неупорядоченности системы энергия активации электродиффузионного переноса уменьшается; причем в

трехмерных системах значительно сильнее, чем в двумерных (рис.3). На рисунке показано, что при увеличении разупорядоченности системы всегда находятся связанные области с более низкими значениями барьеров. В двумерных системах путей протекания меньше в связи с уменьшением степеней свободы для движения ионов ($m_s < m_v$).

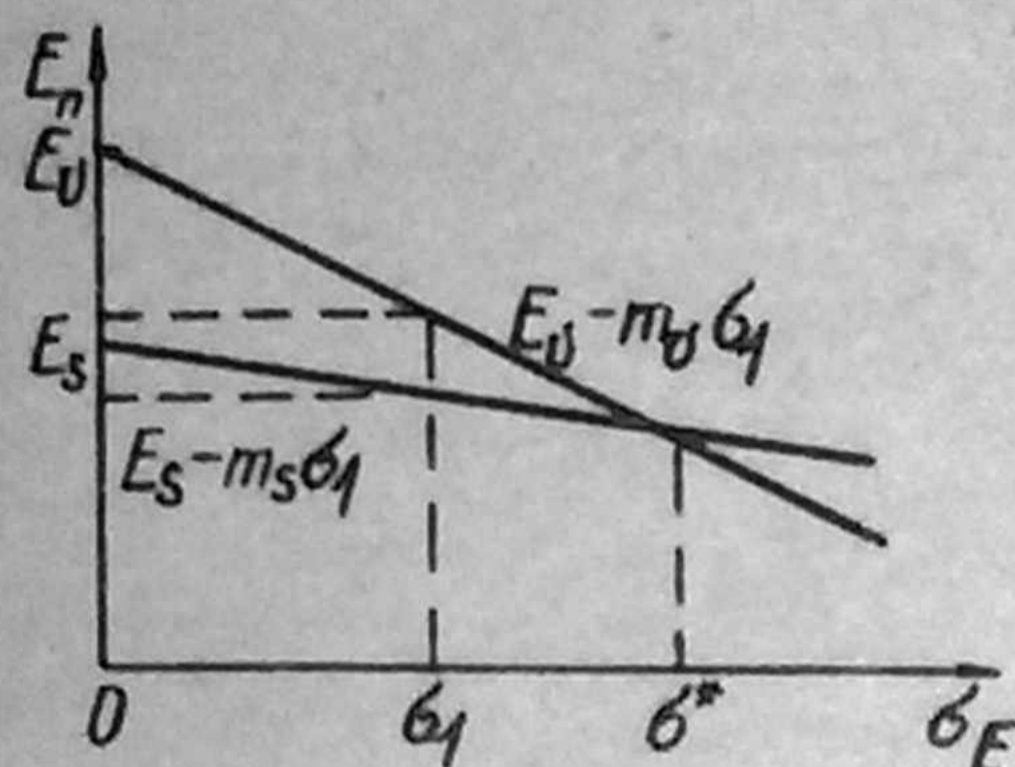


Рис.3. Зависимость энергии активации электродиффузии E_p от дисперсии распределения по барьерам σ_E . E_v, E_s - значения E_p в объеме и на поверхности соответственно. Указан градиент E_p при некотором значении σ_1 , возникающий при переходе от механизма переноса по поверхности. σ^* - значение степени неупорядоченности, при которой E_p равны для обоих механизмов переноса

Влияние размерных эффектов на электроперенос ионов. Дальнейшая миниатюризация электронных устройств приводит к необходимости работать с пленками, размеры зерен в которых становятся соизмеримыми с их поперечными размерами. В этом случае следует ожидать проявления особенностей процессов электродиффузии, связанных с размерными эффектами.

В [4] показано, что в субмикронных пленках увеличивается эффективный заряд ионов. Кроме того, предполагается, что с уменьшением толщины пленки должна уменьшаться энергия активации диффузии за счет возрастания отношения поверхности пленки к ее объему.

Если учесть, что определение Z_b^* для тонких пленок очень сложно, а VI более чувствительно к энергии активации (ввиду экспоненциальной зависи-

мости D_b от E_p), то уменьшение толщины пленки должно приводить к росту энергии активации.

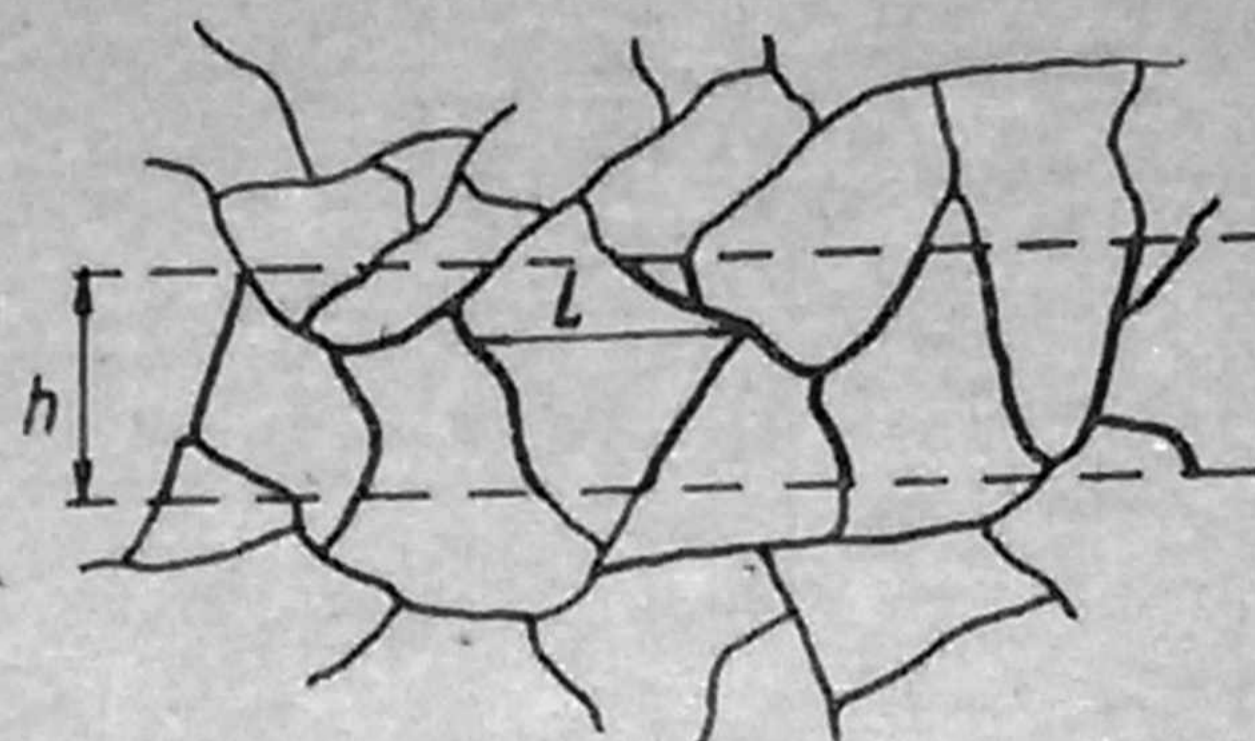


Рис.4. Возникновение объемного и пленочного "бесконечного" кластера [7]. Границы пленки изображены штриховыми линиями, область объемного "бесконечного" кластера, попадающая внутрь пленки, - жирными линиями. L - радиус корреляции, h - толщина пленки

На рис.4 [7] видно, что если пленочный "бесконечный" кластер существует, то он является частью объемного. Однако не всегда часть объемного "бесконечного" кластера, попадающая внутрь пленки, является связанной. Поэтому для возникновения протекания в пленке нужно включить больше сопротивлений, т.е. должно выполняться неравенство $x_c^v < x_c^s$, где x_c - порог протекания для задачи узлов [9], а верхние индексы относятся к объемному v и пленочному s кластерам. Чем тоньше пленка, тем больше должно быть значение x_c^s . При уменьшении толщины пленки h это должно приводить к росту ее удельного сопротивления, а следовательно, к замедлению электродиффузии.

Значение x_c^s определяется из условия равенства радиуса корреляции толщине пленки:

$$L(x_c^s) \approx h.$$

Причем характерным радиусом корреляции является средний диаметр зерен \bar{d} . Поэтому $L \approx \bar{d}(x - x_c)^{-\nu}$. Тогда

$$x_c^s \approx x_c^{-\nu} [1 + c(\bar{d}/h)^{\nu}], \quad (7)$$

где c - константа порядка единицы. Из (7) следует, что с увеличением отношения (\bar{d}/h) начинается качествен-

ная перестройка путей протекания, меняющая топологию "бесконечного" кластера. Это согласно (6) приводит к увеличению E_{Π} и уменьшению электропереноса в целом.

Определение эффективной энергии активации электродиффузионного переноса. Частота переходов иона между двумя состояниями i и j , разделенными случайным барьером E^m , определяется выражением

$$U_{ij} = U_{ij}^0 \exp(-E^m/kT) \exp(\Delta S^m/k), \quad (8)$$

где ΔS^m — энтропия миграции. Число переходов в единицу времени Γ_{ij} будет равно частоте "скачка", умноженной на вероятность того, что рядом имеется вакантное место

$$\Gamma_{ij} = U_{ij} \exp(-E^f/kT) \exp(\Delta S^f/k),$$

где E^f , ΔS^f — энергия и энтропия образования дефекта, участвующего в элементарном акте электропереноса (например, вакансии). В отсутствие электрического поля установится детальное равновесие, и ток перехода $i-j$

$$I_{ij} = -z_b^x e (\Gamma_{ij} - \Gamma_{ji}) = 0.$$

В слабом поле прямые и обратные переходы окажутся несбалансированными. Возникает ионный ток, который в линейном по полю приближении равен

$$I_{ij} = -[(z_b^x e)^2 \Gamma_{ij} E a] / kT,$$

где a — средняя длина "скачка" иона.

Последнее выражение можно записать в виде, напоминающем закон Ома:

$$I_{ij} = R_{ij}(U_i - U_j),$$

где $R_{ij} = kT / [(z_b^x e)^2 \Gamma_{ij}]$, а $(U_i - U_j)$ — напряжение, приходящееся на переход $i-j$. Величина R_{ij} имеет смысл сопротивления перехода $i-j$. С учетом (8) можно записать сопротивление перехода

$$R_{ij} = R_{ij}^0 \exp(\xi_{ij}),$$

где $R_{ij}^0 = kT / \{[(z_b^x e)^2 U_{ij}^0] \exp[(\Delta S^m + \Delta S^f)/k]\}$;

$$\xi_{ij} = (E^m + E^f) / kT.$$

Следовательно, мы получили сетку случайных сопротивлений R_{ij} , соединяющих узлы со случайными барьерами между ними. Важной особенностью рассматриваемой сетки является чрезвычайно широкий спектр значений R_{ij} . Как показано в [7], она является идеальным объектом для применения теории протекания.

Оказывается, что если последовательно в порядке возрастания сопротивлений включать элементы среды, то показатель экспоненты эффективной электропроводности

$$\sigma(r) = \sigma_0 \exp(-\xi(r)) \quad (9)$$

определится теми элементами, которые впервые образуют бесконечную связную область (так называемый "бесконечный" кластер). Удельная концентрация "включенных" сопротивлений называется порогом протекания x_c , а "эффективный" барьер — уровнем протекания E_{Π} . Тогда (9) следует переписать таким образом:

$$\sigma(r) = \sigma_0 \exp(-E_{\Pi}/kT),$$

где $\sigma_0 = 1/(R_{ij} L)$, а $L = l_0 [x - x_c]^{\nu}$ представляет собой радиус корреляции, который характеризует среднее значение расстояния между узлами "бесконечного" кластера, l_0 — постоянная решетки, ν — индекс радиуса корреляции (для трехмерных решеток $\nu = 0,9$) [7].

Уровень протекания для неупорядоченных систем с известными функциями распределения по барьерам $F(E_a)$ вычислен в [9]. Он находится из условия, что доля пространства v , занятого областями с энергией $E \ll E_{\Pi}$, равна инварианту теории протекания $x_c f$:

$$v = x_c f = \int_{-\infty}^{E_{\Pi}} F(E_a) dE, \quad (10)$$

где f — плотность упаковки. Произведение $x_c f$ постоянно и равно ~ 15 для всех трехмерных решеток [7]. Расчет интеграла (10) приводит к следующему выражению:

$$E_{\Pi} = \bar{E}_a - m\sigma E.$$

ВЫВОДЫ

С использованием теории протекания в неупорядоченных средах проведен анализ ионной проводимости в поликристаллических пленках. Получены аналитические выражения, определяющие зависимость энергии активации процесса электродиффузии от структуры тонкопленочной металлизации. Показано, что чем выше степень упорядоченности поликристаллической пленки, тем больше энергия активации процесса электродиффузии.

Установлено, что в субмикронных пленках энергия активации возрастает вследствие изменения топологии путей протекания ионов. В рамках развитых выше представлений о процессах переноса в неупорядоченных средах многие установленные экспериментально [1-4,10] особенности протекания процесса электродиффузии в тонких поликристаллических пленках легко интерпретируются. Действительно, энергия активации электродиффузии, равная уровню протекания E_{Π} , существенно зависит от структуры пленки.

В мелкозернистых пленках ввиду большего разнообразия путей протекания скорость диффузии должна быть выше, чем в крупнозернистых, что и наблюдается экспериментально [2-4]. Сильный разброс размера зерен приводит к увеличению σ_E и уменьшению E_{Π} . Укрупнение зерен и текстурирование пленок блокирует многие из путей протекания ионного тока, уменьшает σ_E и тем самым замедляет процессы миграции [3,4].

В структуре типа "бамбук" [10] размер зерен близок к толщине пленки, а границы зерен перпендикулярны потоку, поэтому электродиффузия замедляется из-за размерных эффектов. Добавление примесей (Cu, O₂, Mg, Si) способствует структурному упорядочению границ зерен и соответственно увеличению E_{Π} .

Из рис.4 следует, что при переходе от переноса по объему к переносу по поверхности энергия активации должна испытывать скачок, меняясь от $E_1 = E_V - m_V \sigma_E$ до значения $E_2 = E_S - m_S \sigma_E$. Такая ситуация характерна для объемных дефектов металлизации типа "тройной точки". Образование "тройных точек" значительно уменьшает время наработки на отказ в тонкопленочной металлизации, где трудно избежать форми-

рования микропустот при перекристаллизации. Поэтому энергия активации электродиффузии в этих структурах значительно ниже теоретически ожидаемой [3,8].

ЛИТЕРАТУРА

1. Blanks H.S. Electronics reliability: a state-of-the-art survey. - *Microelectronics Reliability*, v.20, N 2, 1980, p.219.
2. Тонкие пленки. Взаимная диффузия и реакции: Пер. с англ. Под ред. Дж.Поуга, К.Ту, Дж.Мейера. Пер. под ред. В.Ф.Кисилева, В.В.Поспелова. - М.: Мир, 1982. - 312 с.
3. Schreiber H.-U., Grabe B. Electromigration measuring techniques for grain boundary diffusion activation energy in aluminum. - *Solid-St. Electron.*, v.24, N 12, 1981, p.1135.
4. Колешко В.М., Белицкий В.Ф. Массоперенос в тонких пленках. - Минск: Наука и техника. 1980. - 296 с.
5. Attardo M.J., Rutledge R., Jack R.C. Statistical metallurgical model for electromigration failure in aluminum thin-film conductors. - *J.Appl. Phys.*, 1971, v.42, N 11, p.4343-4349.
6. Нечаев А.М., Рубаха Е.А., Синкевич В.Ф. Моделирование отказов и машинные испытания при исследовании надежности мощных СВЧ транзисторов. - *Микроэлектроника и полупроводниковые приборы/Под ред. А.А.Васенкова и Я.А.Федотова.* - М.: Сов.радио, 1980, вып.5, с.98-117.
7. Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. - М.: Наука, 1979. - 416 с.
8. Соловьев В.Н. Диффузия в аморфных металлических слоях. - *ФММ*, 1982, т.54, вып.5, с.876-879.
9. Соловьев В.Н. Диффузионно-контролируемая деградация некристаллических материалов. - *Электронная техника. Сер.2. Полупроводниковые приборы*, 1983, вып.1(160), с.46.