

О МИКРОМЕХАНИЗМАХ ЭЛЕКТРОДИФФУЗИОННЫХ ОТКАЗОВ ТОНКОПЛЕНОЧНОЙ МЕТАЛЛИЗАЦИИ

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

Теория протекания привлечена для вычисления ионной проводимости поликристаллической пленки. Показано, что кинетику электродиффузионных отказов тонкопленочной металлизации определяет зависящая от степени структурного совершенства пленки энергия активации миграции ионов. Получено выражение для предэкспоненциального множителя коэффициента диффузии. В субмикронных пленках обнаружено возрастание энергии активации за счет изменения топологии «путей протекания» ионов. Экспериментальные данные по времени наработки удовлетворительно согласуются с развитыми представлениями.

Одним из наиболее распространенных отказов в приборах, особенно СВЧ диапазона и интегральных схемах с большой степенью интеграции, является отказ металлизации, вызванный электродиффузией ионов металла [1, 2]. Сложности, возникающие на пути продления ресурса приборов, отказывающихся из-за электродиффузии, связаны с неизученностью физических механизмов, контролирующих процессы переноса в тонких поликристаллических пленках.

Известно [2], что основным каналом массопереноса в поликристаллах являются границы зерен. Попытки построить обобщенные модели, объясняющие кинетические свойства, обусловленные влиянием границ зерен, оказались безуспешными. Эти модели позволяют получить представление лишь об общем характере физических процессов, происходящих в системе, и их можно расценивать как методы моделирования, которые могут аккуратно предсказывать поведение системы только для специально контролируемого набора экспериментальных условий и характеристик материала.

Ниже предлагается микроскопический подход, в котором без конкретизации модели поликристалла возможно получение активационных характеристик пленки.

1. Причины ненулевой дивергенции ионного потока

Для возникновения электродиффузионных нарушений требуется наличие определенных причин, по которым была бы отлична от нуля дивергенция потока диффундирующих ионов.

Поток ионов с эффективным зарядом eZ^* при плотности тока j и удельным сопротивлением пленки ρ равен

$$J = NDeZ^* \rho j / kT, \quad (1)$$

где $N = N_0 \exp(-E^f/kT) \exp(S^f/k)$ — концентрация активированных ионов в материале с плотностью N_0 атомов в единице объема; E^f , S^f — энергия и энтропия формирования дефекта, участвующего в элементарном акте переноса; D — коэффициент диффузии ионов; e — заряд электрона; k — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура.

Дивергенция потока (1) такова

$$\nabla J = J (\nabla N/N + \nabla Z^*/Z^* + \nabla D/D - \nabla T/T). \quad (2)$$

Из (2) видно, что нарушение непрерывности потока ионов может вызываться многими факторами: градиентами концентрации активированных ионов, эф-

эффективного заряда, коэффициента диффузии, температуры. Все перечисленные факторы связаны с микроструктурой тонкой пленки. Используя уравнение непрерывности

$$dN/dt = -\nabla J$$

и соотношение (2), получим выражения для времени наработки пленки на отказ [3]

$$t_n = - \int_0^{N_{кр}} dN/\nabla J, \quad (3)$$

$N_{кр}$ — концентрация атомов, переноса которых в месте неоднородности достаточно для наступления отказа.

Далее предположим, что, во-первых, в течение времени развития нарушения дивергенция потока почти постоянна и сильно меняется только в момент наступления отказа и, во-вторых, вдоль образца ненулевым является только градиент температуры. Тогда имеем

$$t_n \simeq J^{-1}. \quad (4)$$

С учетом формулы (1) и соотношения Аррениуса для температурной зависимости коэффициента диффузии

$$D = D_0 \exp(-E_a/kT)$$

получим известное упрощенное соотношение между временем наработки и некоторыми параметрами проводника (коэффициентом диффузии, эффективным зарядом, плотностью тока, температурой)

$$t_n = A j^{-n} (eZ^*D)^{-1} \exp(E_a/kT), \quad (5)$$

D_0 — предэкспоненциальный множитель коэффициента диффузии; A — константа, зависящая от структуры пленки и геометрии образца; n — вариационный параметр.

В настоящей работе рассмотрена специфика электромиграции, связанная с особенностями процессов диффузии в тонких пленках.

2. Процессы переноса частиц в неупорядоченных средах

Наиболее существенным отличием неупорядоченной структуры от кристаллической является отсутствие пространственной периодичности потенциального рельефа для движения атомов. В этом случае задается вероятность $F(E)$ реализации того или иного вида потенциальной энергии иона E как функции координат r [4]. Исследование процессов переноса в случайном поле приводит к необходимости решения кинетического уравнения, нелинейным образом зависящего от действующего поля. Задача усложняется при учете перераспределения зарядов во внешнем поле, что делает ее достаточно сложной даже для простейших модельных систем [4].

В последние годы к подобного рода задачам с успехом применяется формализм теории протекания [5]. Покажем, что задачу о вычислении основных параметров ионной проводимости — энергии активации и предэкспоненциального множителя — можно найти в рамках теории протекания.

Вычислим частоту переходов иона из состояния i в состояние j , разделенных случайным барьером величины E^m

$$\nu_{ij} = \nu_0 \exp(-E^m/kT) \exp(S^m/k). \quad (6)$$

Число переходов типа $i \rightarrow j$ в единицу времени, очевидно, равно

$$\Gamma_{ij} = \nu_{ij} \exp(-E^j/kT) \exp(S^j/k), \quad (7)$$

S^m — энтропия миграции. В отсутствие электрического поля имеет место детальное равновесие и ток перехода $i \rightarrow j$ равен нулю. В слабом электрическом поле

напряженностью E прямые и обратные переходы несбалансированы. Возникает ток, величина которого в линейном по полю приближении равна

$$I_{ij} = -[(eZ^*)^2 \Gamma_{ij} E_a] / kT, \quad (8)$$

где a — средняя длина скачка.

Выражение (8) перепишем в виде, напоминающем закон Ома

$$I_{ij} = R_{ij}^{-1} (U_i - U_j).$$

Здесь $R_{ij} = kT / [(eZ^*)^2 \Gamma_{ij}]$, а $(U_i - U_j)$ суть напряжение, приходящееся на переход $i - j$. Величина R_{ij} имеет смысл сопротивления перехода. С учетом (6)–(7) его можно представить в следующей форме:

Таблица 1

Распределение	$n=2$	$n=3$
	m_s	m_V
Нормальное	0.13	1.04
Равномерное	0.17	1.47
Экспоненциальное	0.40	0.84

$$R_{ij} = R_{ij}^0 \exp(\xi_{ij}), \quad (9)$$

$$R_{ij}^0 = kT / \{(eZ^*)^2 \nu_0 \exp[(S^m + S^f)/k]\},$$

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

Таким образом, мы получили сетку случайных сопротивлений, соединяющих узлы со случайными барьерами между ними. Наиболее важной ее особенностью

является чрезвычайно широкий спектр значений R_{ij} . Как впервые показано в [5], такая система является идеальным объектом для применения теории протекания. Если теперь последовательно в порядке возрастания сопротивлений включать элементы среды, то показатель экспоненты электропроводности

$$\Omega = \Omega_0 \exp(-E_p / kT) \quad (10)$$

определится теми элементами, которые впервые образуют бесконечную связную область, доступную для тока (бесконечный кластер). В (10) E_p — так называемый уровень протекания, представляющий собой «эффективную» величину энергии активации; $\Omega_0 = 1/R_{ij}^0 L$; $L = a |x - x_c|^{-\nu_3}$ — радиус корреляции, характеризующий среднее значение расстояния между узлами бесконечного кластера; a — постоянная решетки; ν_3 — индекс радиуса корреляции. Величина x представляет долю включенных сопротивлений, а x_c — значение x на пороге протекания.

Вычисление уровня протекания с известными функциями распределения барьеров $F(E)$ проведено в [6]. E_p находится из условия, что доля пространства V , занятого областями с энергией $E \leq E_p$, равна инварианту теории протекания $f x_c$

$$V = f x_c = \int_{-\infty}^{E_p} F(E) dE. \quad (11)$$

Для уровня протекания получено соотношение

$$E_p = \bar{E} - m\sigma, \quad (12)$$

где \bar{E} — среднее значение энергии; σ — дисперсия соответствующего распределения; m — константа, зависящая от вида $F(E)$. В табл. 1 приведены значения m для некоторых типов $F(E)$ в трехмерных ($n=3$) и двумерных ($n=2$) случаях.

Из (12) следует, что с увеличением степени неупорядоченности системы σ энергия активации E_p уменьшается, причем, в трехмерных системах значительно более сильно, чем при $n=2$ (рис. 1).

Полученный результат отражает тот факт, что при увеличении разупорядоченности системы всегда находятся связные области с более низкими значениями барьеров. В двумерных системах путей протекания меньше из-за уменьшения количества степеней свободы для движения ионов.

Предэкспоненциальный множитель в (10) также зависит от параметров протекания. Действительно, поскольку [5] $\Omega_0 = 1/R_{ij}^0 L$, а R_{ij}^0 определяется формулой (9), имеем

$$\Omega_0 = (eZ^*)^2 \nu_0 |x - x_c|^{1/2} \exp[(S^+ + S^m)/k]/akT.$$

Используя далее соотношение Эйнштейна

$$D = \sigma kT / N (eZ^*)^2,$$

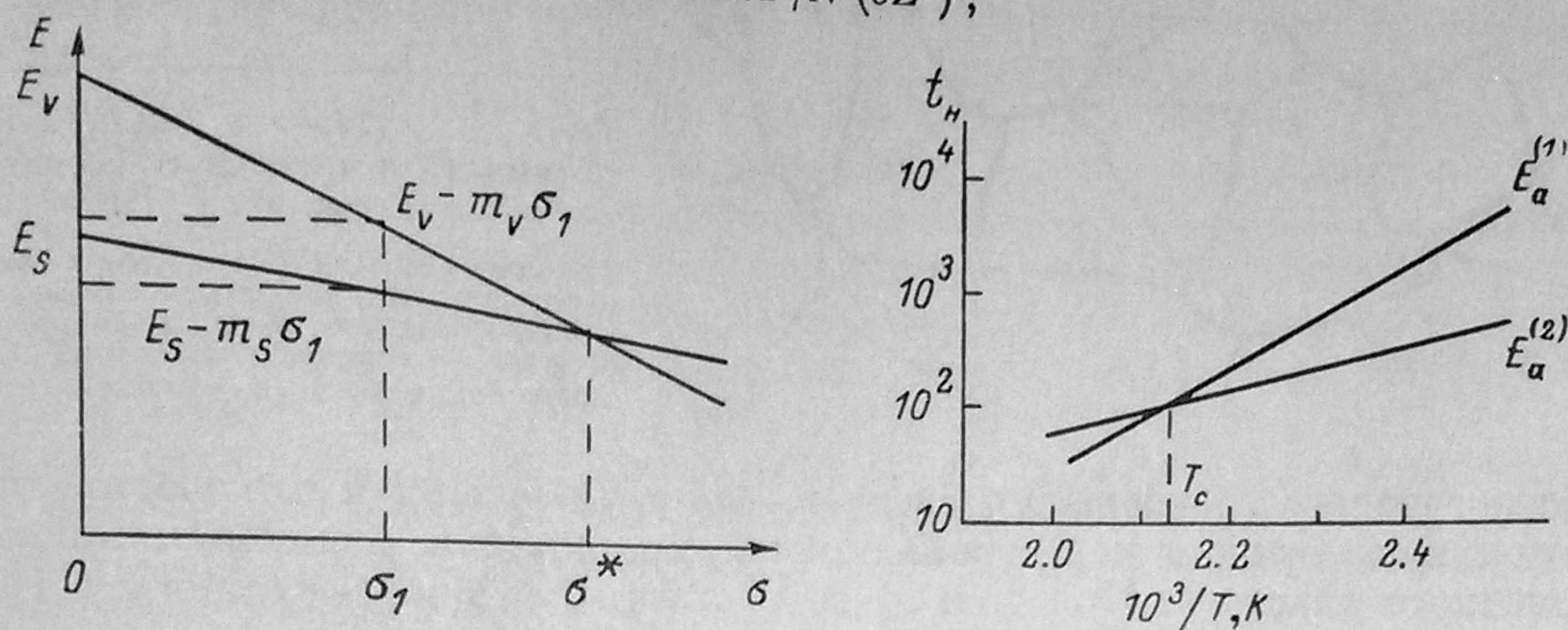


Рис. 1. Зависимость энергии активации диффузии от дисперсии распределения по барьерам. E_V , E_S — значения энергий активации в объеме и на поверхности. Указан градиент энергии активации при некотором значении σ_1 , возникающий при переходе от механизма переноса по объему к механизму переноса по поверхности; σ^* — значение степени неупорядоченности, при которой энергии активации равны для обоих механизмов.

Рис. 2. Температурная зависимость времени наработки на отказ.

T_c — значение температуры, выше которой металлизация с меньшей энергией активации более устойчива, чем с большим значением E_a .

для предэкспоненциального множителя коэффициента диффузии, входящего в (5), получим

$$D_0 = \nu_0 |x - x_c|^{1/2} \exp(S^m/k) / N_0 a. \quad (13)$$

Из (13) следует, что величина D_0 , а следовательно, и время наработки имеют особенность в окрестности порога протекания: при $x \simeq x_c$ t_n стремится к бесконечности ввиду того, что бесконечным становится радиус корреляции.

На рис. 2 приведена ситуация, когда пленка с большей энергией активации менее устойчива к электродиффузионным отказам, чем пленка с меньшим значением E_a ($E_a^{(1)} > E_a^{(2)}$). Это может случиться в системах при температурах $T > T_c$, когда на пороге протекания множитель D_0 для пленки 2 меньше, чем для пленки 1.

3. Влияние размерных эффектов на электроперенос ионов в тонких пленках

Дальнейшая микроминиатюризация электронных устройств приводит к необходимости работать с пленками, средние размеры зерен которых становятся соизмеримыми с их поперечными размерами. В этом случае следует ожидать проявления особенностей процессов электродиффузии, связанных с размерными эффектами.

На рис. 3 схематически представлена картина возникновения объемного и пленочного бесконечных кластеров [5]. Видно, что если пленочный бесконечный кластер существует, то он является частью объемного. Однако не всегда часть объемного бесконечного кластера, попадающая вовнутрь пленки, является связанной. Поэтому для возникновения протекания в пленке нужно включить больше сопротивлений, т. е. должно выполняться неравенство $x_c^V \leq x_c^S$ (верхние индексы относятся к объемному V и пленочному S кластерам соответственно). Чем меньше толщина пленки d , тем больше должно быть значение x_c^S . При уменьшении d до размеров зерна r это должно приводить к росту удельного сопротивления пленки и, следовательно, к замедлению электродиффузии.

Из рис. 3 можно заметить, что значение x_c^S определяется из условия равенства радиуса корреляции толщине пленки: $L(x_c^S) \simeq d$, причем характерной длиной радиуса корреляции является средний размер зерен. Поэтому $L = r(x - x_c)^{-1/3}$. Теперь $(x_c^S - x_c^V)^{-1/3} = d/r$ или $x_c^S = x_c^V [1 + C(r/d)^{1/3}]$, где C — численная константа порядка единицы.

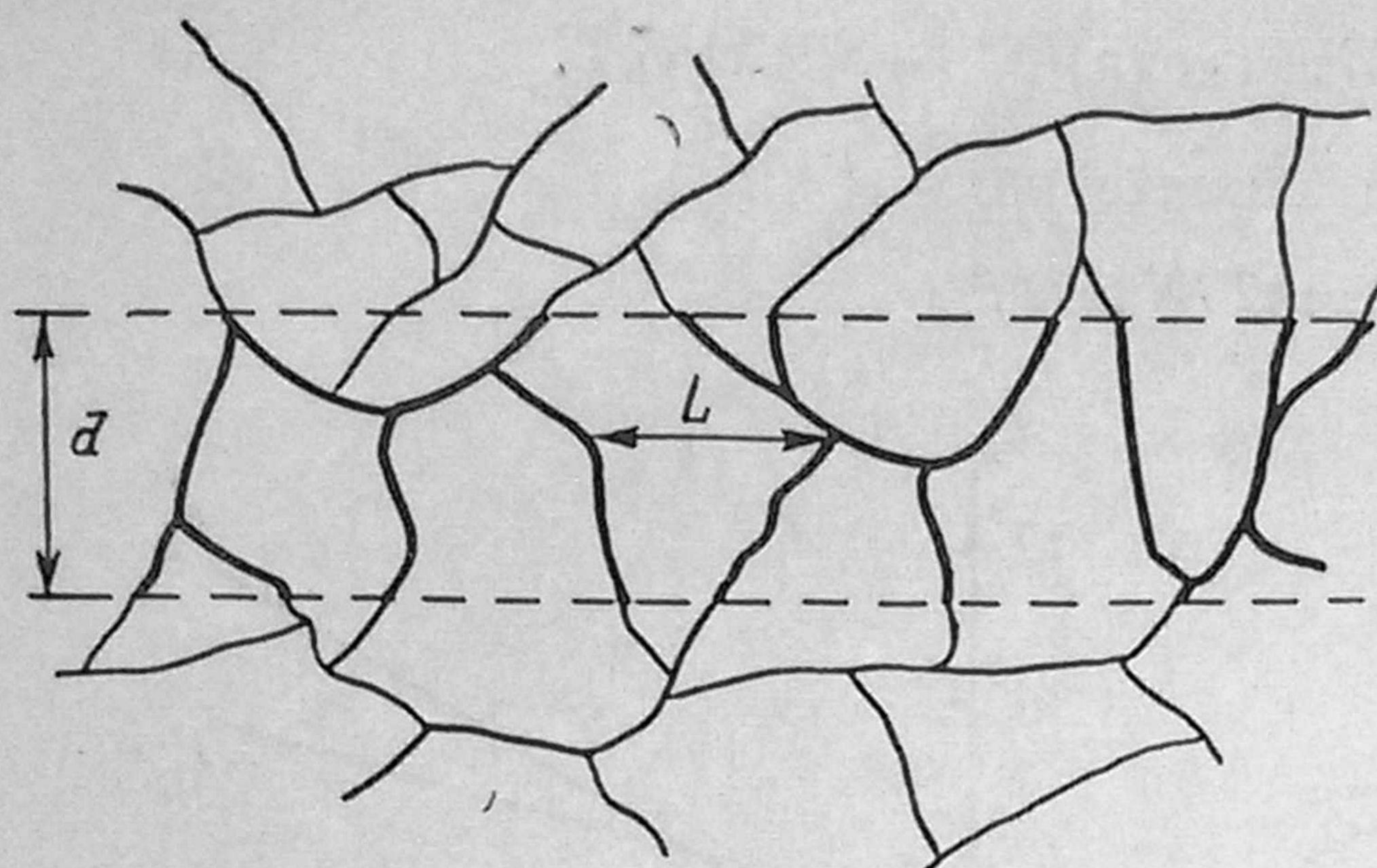


Рис. 3. Картина возникновения объемного и пленочного бесконечных кластеров [5].

Границы пленки изображены штриховыми линиями; область объемного бесконечного кластера, попадающая во внутрь области, — жирными линиями. L — радиус корреляции, d — толщина пленки.

Из последнего соотношения следует, что с увеличением отношения r/d начинается качественная перестройка путей протекания, меняющая топологию бесконечного кластера. При этом x_c^S возрастает. Это в соответствии с (11) приводит к увеличению E_p и уменьшению электропереноса.

4. Обсуждение результатов

В табл. 2 приведены значения энергии активации электродиффузии в алюминии [7], полученные разными авторами, использующими различные методики.¹

Таблица 2

Измерение	E_a , эВ
Срока службы	0.48—1.20, 0.30—1.20, 0.51—0.73, 0.55, 0.29—0.60, 0.41, 0.61, 0.40—0.60, 0.67
Накопления и истощения массы Поперечной полоски	0.70, 0.74, 0.63
Электросопротивлений	0.70
Скорости дрейфа	0.50—0.60, 0.50—0.73, 0.45—0.72
	0.50—0.55

Анализ литературных данных позволяет сделать следующие выводы.

1. Энергия активации миграции Al в поликристаллических пленках изменяется в широких пределах (0.3—1.2 эВ) в зависимости от структуры зерна и способа получения пленки.

2. Наблюдается сильная зависимость E_a от структурных нерегулярностей пленок. Так, время наработки на отказ для пленок с большим распределением по размерам зерен меньше, чем в случае однородных по размеру зерен пленки.

3. В текстурированных пленках, а также в пленках со структурой типа «бамбук» (размеры зерен порядка толщины пленки, а границы зерен перпендикулярны потоку) процессы переноса существенно заблокированы [8].

4. Введение в пленки некоторых примесей (Cu, O₂, Mg, Si) замедляет процессы электродиффузии [1].

5. Использование аморфных пленок, особенно при высоких температурах, приводит к замедлению процессов электропереноса [9].

В рамках развитых выше представлений о процессах переноса в неупорядоченных средах структурно-чувствительные особенности электродиффузии легко интерпретировать. На самом деле энергия активации электродиффузии, равная уровню протекания, существенно зависит от структурного совершенства пленки. В мелкозернистых пленках ввиду большего разнообразия путей протекания скорость диффузии должна быть выше, чем в крупнозернистых.

¹ Подробное описание экспериментальных методов нахождения E_a содержится в [2].

Сильный разброс пленок по размерам зерен приводит к увеличению разброса по барьерам и уменьшению E_p . Укрупнение пленок или еще лучше их текстурирование блокирует многие из путей протекания ионного тока, уменьшает дисперсность барьеров. Процессы миграции замедляются.

В структурах типа «бамбук» электродиффузия подавлена вследствие размерных эффектов. Наконец, добавление примесей способствует структурному упорядочению пленки.

Отметим еще один результат, вытекающий из расчетов. Из рис. 1 видно, что при переходе от переноса по объему к переносу от поверхности энергия активации испытывает скачок, меняясь от величины $E_1 = E_V - m_V \sigma$ до $E_2 = E_S - m_S \sigma$. Такая ситуация характерна для объемных дефектов металлизации типа «тройной точки», когда в одной точке сходятся границы зерен. Образование «тройных точек» значительно уменьшает время наработки тонкопленочной металлизации, в которой трудно при перекристаллизации избежать образования микропустот. Видимо, поэтому энергия активации электродиффузии в бамбуковых структурах значительно ниже теоретически ожидаемой величины [8].

Наконец, устойчивость аморфных пленок относительно электродиффузии можно объяснить исходя из особенностей поведения предэкспоненциального множителя коэффициента диффузии. Скорее всего более разупорядоченные (чем поликристаллические) аморфные пленки имеют и меньшие значения D_0 . Тогда, согласно (5), их время наработки будет выше.

Литература

- [1] Колешко В. М., Белицкий В. А. Массоперенос в тонких пленках. Минск: Наука и техника, 1980. 428 с.
- [2] Тонкие пленки. Взаимная диффузия и реакции / Под ред. Поута Дж., Ту К., Мейера Дж. М.: Мир, 1982. 576 с.
- [3] Нечаев А. М., Рубаха Е. А., Синкевич В. Ф. Механизмы отказов и надежность мощных СВЧ транзисторов. — Обзоры по электронной технике. Сер. 2. Полупроводниковые приборы, 1978, в. 10 (577), с. 1—80.
- [4] Бонч-Бруевич В. Л., Звягин И. П., Кайпер Р. и др. Электронная теория неупорядоченных полупроводников. М.: Наука, 1981. 384 с.
- [5] Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979. 416 с.
- [6] Соловьев В. Н. Диффузия в аморфных металлических слоях. — ФММ, 1982, т. 54, № 5, с. 876—879.
- [7] Schreiber H.-U., Grabe B. Electromigration measuring techniques for grain boundary diffusion activation energy in aluminum. — Solid State Electron., 1981, v. 24, № 12, p. 1135—1146.
- [8] Pierce J. M., Thomas M. E. Electromigration in aluminum conductors which are chains of single crystals. — Appl. Phys. Lett., 1981, v. 39, № 2, p. 165—169.
- [9] Christon A., Anderson W. T. Jr., Bark M. L. et al. Reliability of amorphous metallizations for GaAs FETS. — In: 20th Ann. Proceed. Reliab. Phys., Calif., San-Diego, 1982, p. 188—193.

Криворожский государственный
педагогический институт

Поступило в Редакцию
20 апреля 1984 г.