——— МОДЕЛИРОВАНИЕ ——

УДК 530.145.6

КИНЕТИКА ЭЛЕКТРОМИГРАЦИОННОГО МАССОПЕРЕНОСА В ИНТЕРФЕЙСНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ МИКРО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПРОЧНОСТИ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

© 2024 г. Т. М. Махвиладзе^{1, *}, М. Е. Сарычев^{1, **}

¹Физико-технологический институт им. К. А. Валиева РАН НИЦ "Курчатовский институт"

Москва, Россия *E-mail: tarielmakh@mail.ru **E-mail: sarych@yandex.ru Поступила в редакцию 15.02.2024 г. После доработки 20.03.2024 г. Принята к публикации 20.03.2024 г.

В работе проведено усовершенствование и расширение области применения предложенной ранее авторами теоретической модели, которая описывает взаимосвязь прочностных и электромиграционных (диффузионных) свойств интерфейсов, образованных соединенными материалами. В рамках развитой модели установлено линейное соотношение между величинами работы обратимого разделения интерфейса W_a и энергии активации электромиграции H_{EM} в интерфейсе. Выполнены оценки и проведено сравнение коэффициентов полученного соотношения с данными экспериментов по исследованию электромиграции в медном проводнике, покрытом защитным диэлектриком. Используя также развитую ранее авторами модель, которая описывает зависимость величины W_{a} от концентраций неравновесных решеточных дефектов, имеющихся в объемах соединенных материалов, предсказан и исследован ряд эффектов, обусловленных влиянием такого рода дефектов на процессы, вызванные электромиграцией. В работе показано, что путем введения в объемы соединенных материалов неравновесных решеточных дефектов в виде атомарных примесей внедрения или замещения можно эффективно влиять на характеристики электромиграционной неустойчивости формы межслойной границы. Для примесей внедрения выполнены количественные аналитические оценки концентрации примесей, необходимой для значительного изменения (как увеличения, так и уменьшения) характерного времени нарастания неустойчивости формы изначально плоского интерфейса.

Ключевые слова: интерфейс, электромиграция, работа разделения, решеточные дефекты, адсорбция

DOI: 10.31857/S0544126924030056

1. ВВЕДЕНИЕ

В современных микро- и наноэлектронных устройствах, использующих многослойные межсоединения, значительная доля отказов обусловлена электромиграционным массопереносом в слоях проводника и в граничных областях их соединения со смежными слоями других материалов [1—3]. Поэтому большой практический интерес представляет теоретическое исследование и моделирование ключевых кинетических характеристик процессов электромиграционного переноса.

На сегодняшний день одним из наиболее распространенных типов межсоединений является медная металлизация, в которой, в силу особенностей микроструктуры используемых материалов, подавляющая часть электромиграционного потока ионов и вакансий приходится на интерфейс между слоем медного проводника и слоем защитного диэлектрика [2, 3]. В экспериментах [4, 5] было показано, что для различных диэлектрических покрытий энергия активации электромиграции H_{EM} , определяемая по температурной зависимости скорости роста микрополостей, и работы обратимого разделения W_a (работа адгезии) по границе меди и защитного диэлектрического слоя связаны линейной зависимостью. В работе [4] были также приведены качественные соображения о возможном механизме возникновения подобного соотношения.

В связи с этим в работе [6] была предложена достаточно общая теоретическая модель механизма, приводящего при ряде упрощающих предположений к такого рода корреляции между энергией активации электромиграции и адгезионной прочностью в интерфейсе, в котором соединены материалы со значительной и пренебрежимо малой ионной диффузией, как это имело место в экспериментах [4]. Соотношение между H_{EM} и W_a , полученное в [6], в работе [7] было применено для оценки влияния неравновесных атомарных примесей внедрения на электромиграционную неустойчивость границы соединенных проводящих материалов.

В настоящей работе приведены результаты качественного и количественного развития модели, предложенной в [6] для выяснения взаимосвязи энергии активации электромиграции Н_{FM} по границе соединения проводника и диэлектрика (или проводящего материала с достаточно малой электромиграцией) с работой W_a обратимого разделения этих материалов. Получено более общее и точное, чем в [6], соотношение между величинами H_{FM} и W_a ; выполнены аналитические оценки коэффициентов этого соотношения и проведено детальное сравнение с данными экспериментов [4]. Получены также параметры микроскопической аппроксимации взаимодействия диффундирующего в интерфейсе иона с ионами ближайшего окружения из обоих соединенных материалов и найдены их зависимости от измеряемых величин.

Используя полученное в настоящей работе соотношение, связывающее W_a с H_{EM} , и развитую ранее модель зависимости работы разделения W_a от концентраций неравновесных решеточных дефектов в объемах соединенных слоев [8], проведено также исследование влияния неравновесных атомарных примесей на электромиграционную неустойчивость формы интерфейса соединенных проводящих материалов [9]. Существенно, что в отличие от работы [7] полученные результаты охватывают как примеси внедрения, так и примеси замещения.

2. МОДЕЛЬ ВЗАИМОСВЯЗИ ЭЛЕКТРОМИГРАЦИОННЫХ И АДГЕЗИОННЫХ СВОЙСТВ ГРАНИЦЫ СОЕДИНЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ

В экспериментах [4] была установлена определенная корреляция между энергией активации электромиграции H_{EM} в медной металлизации и работой W_a обратимого разделения по интерфейсу медного проводника и покрывающего его диэлектрика. Как было показано в работе [4], эта корреляция имеет вид линейной зависимости H_{EM} от W_a , где разные значения W_a отвечают различным диэлектрикам, образующим покрытие проводника. В то же время в работе [6] было показано, что такого рода взаимосвязь может быть понята и получена из теоретических представлений о механизме электромиграции в интерфейсе, обобщающих и развивающих качественные соображения, приведенные в [4].

Учтем, что в экспериментах [4] энергия активации электромиграции находилась по измерениям зависимости скорости роста микрополостей в интерфейсе от температуры и, следовательно, определялась электромиграционным потоком вакансий к катоду. При вакансионном механизме диффузии ионов, характерном для металлов и их сплавов

типа твердых растворов замещения, этот поток J_I может быть записан в следующем виде [1]:

$$\vec{J}_I = D_I \left(-\nabla C_I + C_I \frac{Z_V^*}{kT\sigma_0} \vec{j} - C_I \frac{\Omega f_V}{kT} \nabla \sigma_S \right), \quad (1)$$

где D_I — коэффициент диффузии вакансий; C_I — концентрация вакансий; $\sigma_S = (\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33})/3$ — сферическая (шаровая) часть тензора σ_{ik} механических напряжений, возникающих в проводнике в результате массопереноса (∇ — градиент); Z_V^* —

эффективный заряд вакансии [1]; \vec{j} — плотность электрического тока; σ_0 — удельная проводимость материала проводника; Ω — удельный атомарный объем вещества проводника; $f_V \approx (0.2-0.4)$ — коэффициент релаксации вакансий в проводнике [1]; k — постоянная Больцмана; T — абсолютная температура.

Таким образом, $J_I \sim D_I$ и, поскольку коэффициент диффузии $D_I \sim \exp(-E_D / (kT))$ (где E_D — энергия активации диффузии вакансий), то согласно (1) в начальном приближении можно считать, что энергия активации электромиграции $H_{EM} \approx E_D$ (это находится в соответствии с известным феноменологическим соотношением Блэка [1] для времени отказа проводника вследствие электромиграции).

В интересующем нас случае электромиграции по границе (интерфейсу) проводника (материал 1) и материала 2 с пренебрежимо низкой электромиграционной подвижностью (в экспериментах [3, 4] это был защитный диэлектрик) рассмотрим простейшую модель [6], считая, что интерфейс представляет собой плоский слой, образованный приповерхностными слоями соединенных кристаллических материалов 1 (проводник) и 2 (диэлектрик). При этом электромиграционной подвижностью обладают ионы только материала 1. Кроме того, для максимального упрощения математического описании рассмотрим предельный случай, полагая, что диффузия ионов (вакансий) материала 1 в интерфейсе происходит непосредственно в его граничной моноатомной плоскости.

При вакансионном механизме диффузии ионов в материале 1 энергия E_D активации перемещения вакансии в соседний узел в граничной плоскости материала 1 на место находящегося там иона,

определяется работой, которую должен затратить этот ион для перехода через энергетический барьер (седловая точка), чтобы попасть из своего узла в смежную с ним вакансию в этой же плоскости. Тогда энергия активации электромиграции $H_{EM} = E_D$ может быть записана в виде суммы следующих вкладов: первый вклад представляет собой работу преодоления сил межатомного взаимодействия (притяжения) между ионом материала 1, диффундирующим в граничной плоскости, и его ближайшими соседями в этой плоскости; второй вклад — работу преодоления сил взаимодействия между этим ионом и его ближайшими соседями в объеме материала 1; третий вклад — работу преодоления сил взаимодействия с ионами граничной плоскости материала 2. Таким образом,

$$H_{EM} = z_{1S} \int P_{1S}(x_{1S}) dx_{1S} + z_{1V} \int P_{1V}(x_{1V}) dx_{1V} + z_I \int P_I(x_I) dx_I, \qquad (2)$$

где P_{1S} , P_{1V} и P_{I} – силы, с которыми растягиваются межатомные связи диффундирующего иона с ближайшими соседями в кристаллических решетках граничной плоскости материала 1, его объема и граничной плоскости материала 2 в соответствии с межатомными потенциалами в этих решетках (считаем здесь, что P_I перпендикулярна границе); x_{1S} , x_{1V} и x_{I} — возникающие при этом изменения расстояний от иона до соответствующих ближайших соседей вдоль линий действия сил P_{1S} , P_{1V} и P_I ; z_{1S} , z_{1V} и z_I — число ближайших соседей иона (координационные числа) в соответствующих решетках. Для того чтобы избежать излишней громоздкости при записи формулы (2) и последующих соотношений, без потери общности, считаем, что взаимодействие диффундирующего иона с его ближайшими соседями в указанных решетках дает одинаковый вклад. В формуле (2) также подразумевается, что пределы интегрирования отвечают начальному ($x_{1S} = x_{1V} = x_I = 0$ — нижние пределы) и конечному положению диффундирующего иона при его переходе из узла решетки граничной плоскости материала 1 в седловую точку (верхний предел), положение которой определяется конкретной кристаллической структурой материалов 1 и 2 и параметрами смежной вакансии.

Отметим, что вблизи положения равновесия в узле решетки граничной плоскости материала 1 (т.е. при малых значениях смещений x_{IS} , x_{IV} и x_I около минимумов соответствующих межатомных потенциалов взаимодействия) движение иона вследствие его взаимодействия с ближайшими соседями может рассматриваться как классические колебания [10]. В этом случае для зависимостей $P_{1S}(x_{1S}), P_{1V}(x_{1V})$ и $P_I(x_I)$ справедливо линейное приближение (закон Гука):

$$P_j = K_j x_j \,, \tag{3}$$

где индекс j = 1S, 1V, I и K_j — коэффициенты "упругости" соответствующих связей.

Силу P_I можно связать с величиной работы W_a , которую необходимо затратить для обратимого разделения материалов 1 и 2 по интерфейсу между ними (работа адгезии). Как известно, эта работа (в расчете на единицу площади интерфейса) дается выражением [8]

$$W_a = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{12}, \qquad (4)$$

где γ_1 , γ_2 и γ_{12} — коэффициенты поверхностного натяжения свободных поверхностей материалов 1 и 2 и интерфейса между ними соответственно. Величина (4), называемая также обратимой работой адгезии, характеризует адгезионную прочность границы (интерфейса) между материалов 1 и 2.

Пусть к материалам 1 и 2 перпендикулярно границе между ними приложено растягивающее механическое напряжение *s* (сила в расчете на единицу площади интерфейса), приводящее к квазистатическому обратимому увеличению зазора между материалами вплоть до полного их разделения. В этом случае напряжение s = s(d) является функцией смещения *d* граничных плоскостей соединенных материалов относительно их положения в исходном ненагруженном состоянии (в этом состоянии d = 0).

Поскольку растягивающее напряжение s(d) действует против сил межатомных связей притяжения атомов граничных плоскостей материалов 1 и 2 в интерфейсе, то при обратимом разделении они должны точно компенсировать друг друга, т.е. $\delta = x_I$ и в соответствии с определением величины *s* имеет место равенство

$$\sigma(\delta) = \sigma(x_I) = n_I P_I(x_I),$$

где n_I — количество таких связей в интерфейсе в расчете на единицу его площади. Тогда работа W_a , затраченная на обратимое разделение материалов, может быть записана в следующем виде (см. также [6]):

$$W_a = n_I \int_0^{\delta_c} P_I(x_I) dx_I, \qquad (5)$$

где $x_I = 0$ отвечает исходному ненагруженному состоянию границы, а $x_I = \delta_c$ — минимальное смещение, начиная с которого межатомным взаимодействием можно пренебречь, и материалы 1 и 2 могут рассматриваться как полностью разделенные. Тогда при $x_I = \delta_c$ уже не требуется прикладывать растягивающее напряжение, т.е. $\sigma(\delta_c) \sim P_I(\delta_c) = 0$.

Таким образом, зависимость $\sigma(x_I) \sim P_I(x_I) \geq 0$ и должна обращаться в нуль при $x_I = 0$ и $x_I = \delta_c$, т.е. иметь максимум на этом интервале. Для дальнейшего аппроксимируем подобного типа зависимость $P_{I}(x_{I})$ некоторой аналитической функцией. С этой целью можно использовать, например, половину периода синусоиды следующего вида [4, 6]:

$$P_I(x_I) = P_{I0}\sin(\pi x_I / \delta_c), \ 0 \le x_I \le \delta_c, \qquad (6)$$

где *P*₁₀ — максимальная величина силы, необходимой для обратимого разделения материалов 1 и 2 (в расчете на одну межатомную связь через интерфейс); аппроксимация (6) симметрична относительно точки $x_I = \delta_c / 2$.

Здесь, однако, используем аппроксимацию более общего (несимметричного) вида:

$$P_I(x_I) = P_{I0} - \varepsilon_1 (x_m - x_I)^2, \ 0 \le x_I \le x_m;$$
 (7a)

$$P_I(x_I) = P_{I0} - \varepsilon_2 (x_I - x_m)^2, \ x_m \le x_I \le \delta_c, \ (76)$$

где P_{I0} — максимальная величина силы P_{I} , достигаемая при некотором $x_i = x_m \, (0 < x_m < \delta_c),$ т.е. $P_{I0} = P_I(x_m); \epsilon_1, \epsilon_2$ — параметры, для которых, учитывая условия $P_I(0) = P_I(\delta_c) = 0$, из (7) получим $\varepsilon_1 = P_{I0} / x_m^2$, $\varepsilon_2 = P_{I0} / (\delta_c - x_m)^2$. Используя эти соотношения, преобразуем (7) к виду

$$P_{I}(x_{I}) = P_{I0} \Big[2x_{I} / x_{m} - (x_{I} / x_{m})^{2} \Big],$$

$$0 \le x_{I} \le x_{m}; \qquad (8a)$$

$$\leq x_I \leq x_m; \tag{8a}$$

$$P_{I}(x_{I}) = P_{I0} \left[1 - \frac{x_{m}^{2}}{(\delta_{c} - x_{m})^{2}} (x_{I} / x_{m} - 1)^{2} \right],$$

$$x_m \le x_I \le \delta_c. \tag{86}$$

Сопоставляя аппроксимацию (8) при $x_I << x_m$ с линейным соотношением (3), получим, что

$$P_{I0} = K_I x_m / 2. (9)$$

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА том 53 Nº 3 2024

Интегрируя теперь аппроксимацию (8), умноженную на n_I , при $x_I \in [0, \delta_c]$, имеем для работы

$$W_a = n_I \int_0^{\delta_c} P_I(x_I) dx_I = (n_I K_I x_m / 2) [J_1 + J_2], \ (10)$$

гле

$$J_{1} = \int_{0}^{x_{m}} \left[2x_{I} / x_{m} - (x_{I} / x_{m})^{2} \right] dx_{I} = \frac{2}{3} x_{m}$$

$$J_{2} = \int_{x_{m}}^{\delta_{c}} \left[1 - \frac{x_{m}^{2}}{(\delta_{c} - x_{m})^{2}} (x_{I} / x_{m} - 1)^{2} \right] dx_{I} = \frac{2}{3} (\delta_{c} - x_{m}).$$

Подстановка этих выражений в (10) дает

$$W_a = (n_I K_I x_m \delta_c / 3), \tag{11}$$

T.e. $K_I \sim W_a$.

Считая, что при движении диффундирующего иона из решеточного узла до седловой точки растяжение его связей с ближайшими соседями значительно меньше, чем требуется для их разрыва, т.е. выполняются условия приближения (3), и подставляя выражение (3) для P_I в (2), получаем энергию активации электромиграции в виде

$$H_{EM} = z_{1S} \int P_{1S} dx_{1S} + z_{1V} \int P_{1V} dx_{1V} + z_I K_I \int x_I dx_I,$$

где λ — средняя по ближайшим соседям величина смещения x₁, отвечающая положению седловой точки (пределы остальных интегралов оговаривались выше в (2)). Выполняя в третьем слагаемом интегрирование и используя соотношение (11), находим:

$$H_{EM} = E_D = \alpha + \overline{\beta} W_a, \tag{12}$$

гле

$$\overline{\beta} = 3z_I \lambda^2 / 2n_I x_m \delta_c = (3\delta_c / \pi^2 x_m) \chi_s$$

а $\chi = \pi^2 z_I \lambda^2 / (2n_I \delta_c^2)$ — соответствующий коэффициент, получающийся вместо $\overline{\beta}$ для синусоидальной аппроксимации (6). Поскольку $x_m < \delta_c$, то, вводя

коэффициент 0 < k < 1, можем записать $x_m = k\delta_c$, и тогда согласно (12) $\overline{\beta} = (3 / (\pi^2 k))\chi \equiv A\chi$. В частности, при $k \approx 1/3$ имеем $A \approx 1$ и $\overline{\beta} \approx \chi$, а при $x_m = \delta_c / 2$ (симметричная аппроксимация (7)) этот числовой множитель $A = 6 / \pi^2 \approx 0.6$, т.е. χ и $\overline{\beta}$ являются величинами одного порядка.

Отметим здесь, что модельное описание с помощью аппроксимации (7) обладает дополнительной (по сравнению с (6)) возможностью более точного приближения зависимости $P_{I0}(x_I)$ за счет выбора значения параметра x_m . В частности, используя соотношения (9) и (11) и замечая, что в оба входит произведение $K_I x_m$, имеем:

$$P_{I0} = (3 / 2)\eta / \delta_c$$
или $S \equiv K_I x_m = 3\eta / \delta_c$

где $\eta = W_a / n_I$ — величина, которая в силу соотношения (4) может быть измерена [4]. Таким образом, считая, что δ_c можно задать достаточно определенно ($\delta_c \sim 10$ Å), получим, что параметры P_{I0} и $S \sim x_m$ выражаются через измеряемую величину $\eta = W_a / n_I$. Это обстоятельство может быть использовано при выборе таких значений характеристик P_{I0} и x_m аппроксимации (7), которые наилучшим образом подходят для описания интерфейса конкретных материалов.

Представляет интерес сравнить соотношение (12) с данными экспериментов [4] по электромиграции в интерфейсе между медным проводником и различными диэлектрическими покрытиями. В частности, в [4] было получено, что соотношение между энергией активации электромиграции H_{EM} в такой структуре и работой η обратимого разделения соответствующего интерфейса (в расчете на одну межатомную связь через интерфейс медь — диэлектрик) наилучшим образом описывается линейной зависимостью вида

$$H_{EM} = 0.35 + 0.26\eta \,(\Im B). \tag{13}$$

Поскольку $\eta = W_a / n_I$, то линейная зависимость (12), которая следует из модели, примет такой вид:

$$H_{EM} = \alpha + B(\pi^2 z_I \lambda^2 / (2\delta_c^2))\eta, \qquad (14)$$

где $B = 3 / (\pi^2 k)$ для аппроксимации (7). Как следует из (12) и (14) параметр α связан только с характеристиками проводящего материала 1 (меди). По смыслу этих соотношений он должен быть равен энергии активации диффузии по свободной поверхности материала 1. Такой же смысл имеет и первое слагаемое (0.35 эВ) в (13) (см. [4], где данные при $\eta = 0$ отнесены к миграции адатомов медного проводника на свободной поверхности меди).

Оценим коэффициент при у в соотношении (14). Из общих соображений коэффициент $k = x_m / \delta_c$, определяющий относительное расположение максимума зависимости силы $P_{I}(x_{I})$ межатомного взаимодействия, можно оценочно считать равным $k \approx 1 / 3 - 2 / 3$. Это дает для аппроксимации (7) оценку 0.5 < B < 1, т.е. в (14) можно считать B = O(1). Учтем далее, что число ближайших соседей в объеме кристаллических решеток кубического типа по порядку величины ≤ 10. Значит по смыслу величины *z*_I (число ближайших соседей через интерфейс) для оценок вполне можно взять $z_I \sim 3 - 5$. Поскольку $\lambda << x_m < \delta_c$, то с учетом принятой выше оценки $x_m / \delta_c \approx (1 / 3 - 2 / 3)$ и взяв, например, $\lambda / \delta_c \sim 0.1$, для коэффициента при η в (14) имеем оценку $B(\pi^2 z_I \lambda^2 / (2\delta_c^2)) \approx 0.15 - 0.25$, что достаточно близко к экспериментальному значению 0.26 в соотношении (13) для меди.

Отметим, что развитая модель, приводящая к соотношениям (12) и (14), имеет достаточно общий характер. При вакансионном механизме диффузии в металлическом проводнике она связывает электромиграционные (диффузионные) и прочностные характеристики интерфейса между проводником и материалом, в котором электромиграция отсутствует. Ниже проанализированы два практически важных примера применения соотношения (12).

3. ЗАВИСИМОСТЬ КИНЕТИКИ ЭЛЕКТРОМИГРАЦИОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ ИНТЕРФЕЙСА ПРОВОДЯЩИХ МАТЕРИАЛОВ ОТ ИХ ДЕФЕКТНОСТИ

Применим модель, развитую в предыдущем разделе, для оценки влияния неравновесных решеточных дефектов на кинетику неустойчивости формы интерфейса между проводящими материалами под действием электромиграционного массопереноса.

С этой целью используем результаты работы [9], в которой была развита теория, описывающая влияние электромиграции, протекающей в границе (интерфейсе) слоев проводящих соединенных материалов в условиях действия механического напряжения со стороны подложки, на устойчивость формы изначально плоского этого интерфейса.

В модели, развитой в [9], рассматривается бесконечно протяженный плоский интерфейс (плоскость (x, z)), образованный двумя линейно-упругими проводящими материалами 1 (нижний) и 2 (верхний). Будем считать, что материал 2 представляет полубесконечный по оси у слой (ось у направлена вверх, от материала 1 к 2, а y = 0 отвечает плоскости интерфейса), а материал 1 — плоский слой толщины *H*, лежащий на подложке и располагающийся в полуплоскости y < 0 (y = -H — граница материала 1 и подложки). Считается также, что все величины, относящиеся к соединенным материалам 1 и 2, не зависят от координаты z и z-компонента вектора смещения для всех точек системы равна нулю, т.е. применимо приближение плоской деформации.

Различие микроскопических характеристик материала подложки и лежащего на ней слоя материала 1, а также технологические операции формирования этого слоя приводят к остаточным механическим напряжениям σ_{∞} в нем [9]. Как и в [9], далее считается, что это остаточное напряжение σ_{∞} в слое материала 1 направлено вдоль оси *x*, не зависит от *x* и *y* и носит характер либо сжатия ($\sigma_{\infty} > 0$), либо растяжения ($\sigma_{\infty} < 0$).

Пусть, кроме того, поперек интерфейса в направлении от материала 1 к материалу 2 вдоль оси у действует электрическое поле, генерирующее электрический ток плотностью *j*, который в определенных условиях вызывает массоперенос вдоль интерфейса за счет электромиграции ионов в обоих материалах.

В рамках данной модели в [9] была исследована кинетика пространственного возмущения изначально плоского интерфейса, которое имеет вид

$$h(x,t) = A(t)\sin\omega x, \qquad (15)$$

где h — изменение профиля интерфейса вдоль оси y, отсчитываемое от его исходного положения — плоскости y = 0; A(t) — амплитуда, зависящая от времени t, $\omega = 2\pi / \lambda$ и λ — длина волны. Амплитуда A(t) предполагается малой по сравнению с λ , поэтому анализ ограничивается линейным по A(t) приближением. В рамках линейного по возмущению (15) приближения в [9] было показано, что за счет искривления интерфейса и возникающей вследствие этого вдоль него электромиграции (массопереноса) в определенных условиях

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА том 53 № 3 2024

амплитуда A(t) может экспоненциально со временем t нарастать, т.е. интерфейс становится неустойчивым, что может приводить к выходу из строя микроэлектронного элемента, в котором используется соответствующая структура.

Для более детального анализа и оценок в [9] рассмотрен, в частности, случай, когда соединенные проводящие материалы существенно различаются так, что в одном из них (материал 2) диффузионной подвижностью ионов можно пренебречь. Такая ситуация обычно имеет место в микроэлектронной металлизации по границе между слоем проводника (например, Al или Cu) и барьерным слоем, который делается из материала с низкой диффузионной подвижностью ионов, например нитрида титана TiN [9] (в качестве перспективных исследуются также барьерные слои из рутения Ru [11], которые в сочетании со слоями меди обеспечивают еще и более высокую стойкость к коррозии — так называемая гибридная металлизация).

В этом случае и при условии $H_{00} >> 1$ в [9] было получено, что возмущения (15) с длинами волн $\lambda \ge \lambda_1 = 2\pi / \omega_1$ экспоненциального нарастают со временем, причем характерное время нарастания $\tau_+(\omega_1)$ при $\lambda = \lambda_1$ дается выражением

$$\tau_{+}(\omega_{1}) = 1 / [\omega_{1}^{3}L_{1}G(1-2\nu_{1})](|\sigma_{\infty}| / (2G_{1}^{*})), (16)$$

где $\omega_{l} = \left[-G + \sqrt{G^{2} + 4\xi^{2}\overline{\gamma}\overline{Z_{1}^{*}}j\rho}\right] / (2\xi\gamma);$

$$G = G_1 G_2 / (G_1 + G_2), \ G_{1,2} = E_{1,2} / (2(1 - v_{1,2}^2))),$$

ν_{1, 2} и $E_{1, 2}$ — коэффициент Пуассона и модуль Юнга материалов 1 и 2 соответственно; $\overline{\gamma}$ — коэффициент поверхностного натяжения интерфейса, $\xi = G_1/(G_1 + G_2) = \text{const}; Z_1^*$ — эффективные заряды ионов в потоке электронов (электронном ветре) [1]; $\rho = 2\rho_1\rho_2 / (\rho_1 + \rho_2), \rho_{1, 2}$ — удельные сопротивления материалов; $L_1 = dD_1\Omega_1 / kT$; b — толщина интерфейса D_1 — коэффициент диффузии ионов материала 1 в интерфейсе; Ω_1 — атомарный объем в материале 1; $G_1^* = E_1 / (2(1 + v_1))$.

Таким образом, согласно (16) и с учетом активационного характера диффузии, для времени $\tau_+(\omega_l)$ имеем

$$\tau_{+}(\omega_{1}) \sim 1 / (D_{1}\omega_{1}^{3}) \sim (1 / \omega_{1}^{3}) \exp(E_{D1} / (kT)),$$
 (17)

где *E*_{D1} — энергия активации диффузии атомов материала 1 в интерфейсе.

Учтем, теперь что при вакансионном механизме диффузии $E_{D1} = E_V + E_D$, где E_V — энергия активации образования вакансии в смежном с диффундирующим ионом узле; E_D — энергия активации перехода иона в эту вакансию, т.е. та энергия, для которой получено соотношение (12). Таким образом, согласно (12) и (13), имеем $E_D = \alpha + \bar{\beta}W_a$, и соотношение (17) примет следующий вид:

$$\tau_{+}(\omega_{1}) \sim (1 / \omega_{1}^{3}) \exp(E_{D1} / (kT)) \sim$$
$$\sim (1 / \omega_{1}^{3}) \exp\left[(\alpha + \overline{\beta}W_{a}) / (kT)\right].$$
(18)

С другой стороны, в работах [7, 8] было получено, что в случае наличия в материалах 1 и 2, образующих интерфейс, неравновесных кристаллических дефектов величина $W_a = W_a(\bar{C}_1, \bar{C}_2)$ определенным образом зависит от их концентраций, соответственно \bar{C}_1 и \bar{C}_2 . Если в качестве таких дефектов взять, например, атомарные примеси внедрения или замещения и для простоты рассмотреть случай, когда они имеются только в материале 2, т.е. $\bar{C}_1 = 0$ и $E_D(\bar{C}_2) = \alpha + \bar{\beta} W_a(\bar{C}_2)$, то согласно результатам [8, 12] и соотношению (12), изменение энергии активации $\Delta E_D(\bar{C}_2) = E_D(\bar{C}_2) - E_D^{(0)}$ ($E_D^{(0)} = E_D(\bar{C}_2 = 0)$) дается выражением

$$\Delta E_D(\bar{C}_2) \equiv E_D(\bar{C}_2) - E_D^{(0)} =$$

$$= \bar{\beta} \frac{kT}{\Omega_2} \left\{ bA(h_2) \ln \left[\frac{1 + (h_2 - 1)\bar{C}_2}{1 - \bar{C}_2} \right] - d_2 A(h_{s2}) \ln \left[\frac{1 + (h_{s2} - 1)\bar{C}_2}{1 - \bar{C}_2} \right] \right\}, \quad (19)$$

где $E_D^{(0)} = E_D(0) = \alpha + \overline{\beta} W_a^{(0)}, \quad W_a^{(0)} = W_a(0)$ работа разделения материалов при $\overline{C}_2 = 0$; $A(h_2) = (h_2 - 1) / h_2$ для примеси замещения и $A(h_2) = 1$ для примеси внедрения (то же самое для $A(h_{52})$); $h_2 = K_{a2} / K_{d2}$ (безразмерный параметр), K_{a2} , K_{d2} — константы скорости процессов адсорбции и десорбции примесей при их обмене между объемом *i*-го материала и границей; $h_{52} = K_{a2}^{(s)} / K_{d2}^{(s)}$ (безразмерный параметр); $K_{a2}^{(s)}$ и $K_{d2}^{(s)}$ — константы скорости процессов адсорбции и десорбции примесных атомов на свободной поверхности материала 2 (d_2 — толщина приповерхностного слоя материала 2, в котором эти процессы происходят); Ω_2 — удельный объем, приходящиеся на один атом (молекулу) в материале 2; *b* — ширина интерфейса. В (19) подразумевается, что концентрация \overline{C}_2 неравновесной примеси определяется внешними источниками и поэтому она может быть равной нулю.

Отметим, что величина ω_1 (см. (16)) зависит от коэффициента поверхностного натяжения интерфейса $\overline{\gamma}$, который также является функцией концентраций неравновесных дефектов в соединенных материалах [13]. Однако оценки выполненные в работе [9] показали, что, например для интерфейса Al—TiN, при реальных плотностях тока до $j \leq (10^{12} - 10^{13})$ A/M² в (16) имеет место неравенство $4\xi^2 \overline{\gamma} Z_1^* j \rho / G^2 \sim 10^{-19} j$ (A/M²) << 1, т.е. $\omega_1 \approx (\xi / G) \overline{Z_1^*} j \rho$ ^{II} и не зависит от $\overline{\gamma}$ и концентрации неравновесных дефектов $\overline{C_2}$. Следовательно, с учетом этих условий и соотношений (17) и (18) выражение (16) может быть записано в виде

$$\tau_{+}(\omega_{1}) = \tau_{+}^{(0)}(\omega_{1}) \exp\left[\Delta E_{D}(\bar{C}_{2}) / kT\right], \quad (20)$$

где $\tau_{+}^{(0)}(\omega_1) = \tau_{+}(\omega_1)|_{\overline{C}_2=0}$, а $\Delta E_D(\overline{C}_2)$ дается выражением (19).

Для анализа и оценок зависимости (20) от \overline{C}_2 рассмотрим далее случай $\overline{C}_2 << 1$ и $C_2h_2, C_2h_{s2} >> 1$ (т.е. $h_2 >> 1$ и $h_{s2} >> 1$), в котором выражение (19) для $E_{D1}(\overline{C}_2)$ становится одинаковым для примесей замещения и внедрения, так как $A(h_2) = A(h_{s2}) = 1$:

$$\Delta E_D(\bar{C}_2) = \bar{\beta} \frac{kT}{\Omega_2} \left\{ b \ln(1 + h_2 \bar{C}_2) - d_2 \ln(1 + h_s 2 \bar{C}_2) \right\}. (21)$$

Записывая в (21) для удобства $\Delta E_D(\overline{C}_2)$ как $\varepsilon E_D^{(0)}$, где ε — численный коэффициент, который может быть как положительным (рост $E_D(\overline{C}_2)$ и $\tau_+(\omega_1)$), так и отрицательным (уменьшение $E_D(\overline{C}_2)$ и $\tau_+(\omega_1)$), получим для оценки \overline{C}_2 в зависимости от величины ε выражение вида

$$\bar{C}_{2} = (h_{s2}^{d_{2}/b} / h_{2})^{b/(b-d_{2})} \exp\left[\varepsilon E_{D}^{(0)}\Omega_{2} / \bar{\beta}kT(b-d_{2})\right]. (22)$$

Применим соотношение (22) к достаточно реалистичному случаю, когда $b \sim d_2 \sim |b - d_2|$ и $b > d_2$. Положив для определенности в $\overline{\beta}$ (см. (12))

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА том 53 Nº 3 2024

КИНЕТИКА ЭЛЕКТРОМИГРАЦИОННОГО МАССОПЕРЕНОСА

 $\lambda \leq \delta_c / 2$, $n_I \approx \Omega_2^{-2/3}$, $z_I \sim 1$, $x_m \approx \delta_c (1 / 2 - 1 / 3)$, а также b = 3 Å, $d_2 = 2$ Å, $\Omega_2 \sim \Omega_1 \approx 10^{-29} \text{ м}^3$ [14], $E_D^{(0)} \approx 1$ эВ [6], при комнатных температурах ($kT_{-} \approx 0.025$ эВ) из (22) получим следующую оценку \overline{C}_2 как функцию параметра є:

$$\bar{C}_2 = (h_{s2}^2 / h_2^3) \exp(16\varepsilon).$$
 (23)

Например, при $\varepsilon = 0.3$ (т.е. $\Delta E_D(\overline{C}_2) = 0.3 E_D^{(0)} \sim 0.3$ эВ) и, используя оценку $h_2, h_{s2} \sim 10^8$, полученную в [8] для примеси внедрения, из (23) имеем, что концентрация этой примеси, необходимая для такого увеличения энергии активации, составляет $\bar{C}_2 \sim 10^{-6}$, а при $\varepsilon = 0.5$ $(\Delta H_{EM}(\overline{C}_2) = 0.5 \text{ эВ})$ эта величина составляет $\bar{C}_{2} \sim 10^{-5}$, что согласуется со сделанными выше допущениями относительно величин h_2 , h_{s2} и C_2 . В соответствии с этими оценками и выражением (23) концентрация неравновесной примеси внедрения $\bar{C}_{2} \sim 10^{-6}$ должна приводить к увеличению времени (20) нарастания возмущений

$$\tau_{+}(\omega_{1}) \approx \tau_{+}^{(0)}(\omega_{1})10^{5}.$$

Пусть теперь $h_2 >> 1$ и $h_{s2} >> 1$, но являются величинами разного порядка. Тогда возможно уменьшение энергии активации диффузии E_{D} , т.е. в (22) допустимы значения $\varepsilon < 0$. Пусть, на-пример, $h_2 \approx 10^6$ и $h_{s2} \approx 10^8$, что в рамках арре-ниусовского представления $h_2 \sim \exp(\Delta E_2 / (kT))$, $h_{s2} \sim \exp(\Delta E_{s2} / (kT))$ отвечает при комнатных температурах отличию разниц энергий активации десорбции и адсорбции примеси на свободной поверхности и в интерфейсе ($\Delta E_{s2} - \Delta E_2$) лишь на 0.1 эВ, в то время как сами эти величины для примесей внедрения $\Delta E_{s2}, \Delta E_2 \sim 1$ эВ. Тогда при тех же, как и выше, значениях толщин b и d_2 и других параметров, из (22) при $\varepsilon = -0.1$ (т.е. $\Delta E_D(\overline{C}_2) = -0.1 E_D^{(0)} \sim -0.1$ эВ) и комнатных тем-пературах получим оценку $\overline{C}_2 \sim 10^{-4}$ (что также согласуется с исходным допущением). В этих условиях согласно (20) имеет место уменьшение времени $\tau_{+}(\omega_{1}) \approx \tau_{+}^{(0)}(\omega_{1}) \times 10^{-2}$ (ускорение развития неустойчивости) за счет введения неравновесной примеси внедрения. В условиях ускоренных экспериментов по тестированию надежности, когда T = (500 - 600) К ($kT \approx 0.05$ эВ), из (20) получим, что время развития неустойчивости интерфейса становится значительно короче:

$$\tau_+(\omega_1) \approx \tau_+^{(0)}(\omega_1) 10^{-4}$$
.

Таким образом, полученные оценки показывают, что в зависимости от соотношения адсорбшионных (относительно решеточных дефектов) свойств интерфейса и свободных поверхностей соединенных материалов дефектность материалов может приводить как к ускорению развитию неустойчивости интерфейса, так и к замедлению.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен ряд качественных и количественных изменений, существенно обобщающих и улучшающих предложенную ранее авторами теоретическую модель [6], которая описывает зависимость электромиграционных свойств границы соединенных материалов от ее прочностных характеристик. В частности, использована адекватная аппроксимация межатомного взаимодействия диффундирующих ионов с ближайшими соседними атомами соединенных материалов.

В рамках полученного соотношения между величинами работы обратимого разделения интерфейса W_a и энергии активации электромиграции *H_{FM}* выполнены оценки входящих в это соотношение параметров и проведено сравнение с данными экспериментов [4]. Получены также микропараметры аппроксимации взаимодействия диффундирующего в интерфейсе иона с ионами ближайшего окружения из обоих соединенных материалов и исследованы их зависимости от измеряемых величин. Эти результаты могут быть использованы при выборе таких значений параметров аппроксимации, которые наилучшим образом подходят для описания электромиграционных (диффузионных) свойств различных интерфейсных структур, состоящих из тех или иных актуальных материалов.

Полученное соотношение между величинами работы обратимого разделения интерфейса W_a и энергии активации электромиграции Н_{ЕМ} позволило предсказать и исследовать ряд эффектов, которые при выполнении соответствующих условий могут быть реализованы при прохождении электрического тока, например, через медную металлизацию (или подобную медной). В частности, показано, что путем введения неравновесных решеточных дефектов в виде атомарных примесей внедрения или замещения в объемы соединенных материалов можно эффективно влиять на электромиграционную неустойчивость формы межслойной границы проводящих материалов.

Для примесей внедрения и замещения получены аналитические выражения для их концентраций, необходимых для значительного изменения (как увеличения, так и уменьшения) характерного времени нарастания неустойчивости формы интерфейса. В случае примесей внедрения выполнены количественные оценки таких концентраций.

Результаты работы представляют интерес для решения практически важной задачи совершенствования технологии изготовления элементов микро- и наноэлектроники в целях увеличения времени их работы до отказа, вызываемого электромиграционным массопереносом в многослойных межсоединениях.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФТИАН им. К.А. Валиева РАН НИЦ "Курчатовский институт" по теме № FFNN-2022-0019 "Фундаментальные и поисковые исследования в области создания перспективной элементной базы наноэлектроники и ее ключевых технологий".

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Валиев К.А., Гольдитейн Р.В., Житников Ю.В., Махвиладзе Т.М., Сарычев М.Е. Теория и моделирование нано- и микропроцессов разрушения тонкопленочных проводников и долговечность металлизации интегральных микросхем. Часть 1. Общая теория переноса вакансий, генерации механических напряжений и зарождения микрополостей при электромиграции. Деградация и разрушение многоуровневой металлизации // Микроэлектроника. 2009. Т. 38. № 6. С. 404—427.
- Tio Castro D., Hoofman R.J.O., Michelon J., Gravesteijn D.J. Void growth modeling upon electromigration stressing in narrow copper lines // J. Appl. Phys. 2007. V. 1. No. 102. P. 123515.
- Tu K.N. Recent advances on electromigration in verylarge-scalt-integration of interconnects. J. Appl. Phys. 2003. V. 94. No. 9. P. 5451–5473.
- 4. *Lane M.W., Liniger E.G., Lloyd J.R.* Relationship between interfacial adhesion and electromigration in

Cu metallization // J. Appl. Phys. 2003. V. 93. No. 3. P. 1417–1421.

- Lloyd J.R., Lane M.W., Liniger E.G., Hu C.-K., Shaw T.M., Rosenberg R. Electromigration and adhesion // IEEE Transac. on Device and Materials Reliability. 2005. V. 5. No. 1. P. 113–118.
- 6. *Махвиладзе Т.М., Сарычев М.Е.* Влияние точечных дефектов на скорость электромиграции по границе соединенных материалов // Микроэлектроника. 2020. Т. 49. № 6. С. 450—458. DOI: 10.31857/ S0544126920050051.
- 7. *Махвиладзе Т.М., Сарычев М.Е.* Влияние решеточных дефектов на электромиграционную неустойчивость границы соединенных проводящих материалов // Микроэлектроника. 2022. Т. 51. № 6. С. 443—451.
- 8. Гольдитейн Р.В., Махвиладзе Т.М., Сарычев М.Е. Влияние примесей на работу отрыва по границе соединенных материалов // Поверхность. 2009. № 12. С. 73—78.
- Махвиладзе Т.М., Сарычев М.Е. Неустойчивость границ проводящих слоев элементов интегральных схем под действием электрического тока и механических напряжений // Физ. мезомеханика. 2022. Т. 25. № 1. С. 26—34. DOI: 10.55652/1683-805Х_2022_25_1_26.
- Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Физматлит, 1988. 416 с.
- Bernasconi R., Magagnin L. Ruthenium as diffusion barrier layer in electronic interconnects // J. Electrochem. Soc. 2019. V. 166. No. 1. P. D3219-D3225.
- 12. *Махвиладзе Т.М., Сарычев М.Е.* Влияние точечных дефектов на возникновение электромиграции в проводнике с примесью // Микроэлектроника. 2021. Т. 50. № 5. С. 376—383.
- Гольдитейн Р.В., Махвиладзе Т.М., Сарычев М.Е. Моделирование кинетики адсорбции решеточных дефектов границей соединенных материалов // Поверхность. 2011. № 8. С. 5—11.
- Бабичев А.П., Бабушкина Н.А., Братковский А.М. и др. Физические величины: Справочник / Под ред. И.С. Григорьева и Е.З. Мелихова. М.: Энергоатомиздат, 1991. 825 с.

240

Kinetics of electromigration mass transfer in micro- and nanoelectronics interface elements depending on the strength of thin-film junctions

© 2024 T. M. Makhviladze^{1, *}, M. E. Sarychev^{1, **}

¹Valiev Institute of Physics and Technology of Russian Academy of Sciences National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia *E-mail: tarielmakh@mail.ru **E-mail: sarych@vandex.ru

The theoretical model proposed earlier by the authors, which describes the interrelation of strength and electromigration (diffusion) properties of interfaces formed by joined materials, has been perfected and extended. Within the framework of the developed model, a linear relationship between the values of the work of reversible interface separation W_a and the activation energy of electromigration in the interface H_{EM} was established. The coefficients of the obtained relation are estimated and compared with experimental data on the study of electromigration in a copper conductors covered with protective dielectrics. Using also the model developed earlier by the authors, which describes the dependence of the value on the concentrations of non-equilibrium lattice defects in the volumes of joined materials, a number of effects due to the influence of such defects on the processes caused by electromigration have been predicted and investigated. In the paper we obtained that by introducing non-equilibrium lattice defects in the volumes of bonded materials in the form of atomic impurities of interstition or substitution it is possible to effectively influence the characteristics of electromigration instability of the shape of the interlayer interface. For the introduction impurities, quantitative analytical estimates of the impurity concentration necessary for a significant change (both increase and decrease) in the characteristic rise time of the instability of the shape of the initially flat interface have been obtained.

Keywords: interface, electromigration, separation work, lattice defects, adsorption

REFERENCES

- Valiev K.A., Goldstein R.V., Zhitnikov Yu.V., Makhviladze T.M., Sarychev M.E. Nano- and micrometer-scale thin-film-interconnection failure theory and simulation and metallization lifetime prediction. Part 1: A general theory of vacancy transport, mechanical-stress generation, and void nucleation under electromigration in relation to multilevel-metallization degeneration and failure // Russ. Microelectronika. 2009. V. 38. No. 6. P. 404–427. DOI: 10.1134/ S106373970906002X.
- Tio Castro D., Hoofman R.J.O., Michelon J., Gravesteijn D.J. Void growth modeling upon electromigration stressing in narrow copper lines // J. Appl. Phys. 2007. V. 102. P. 123515.
- Tu K.N. Recent advances on electromigration in very-large-scalt-integration of interconnects // J. Appl. Phys. 2003. V. 94. No. 9. P. 5451–5473.
- Lane M.W., Liniger E.G., Lloyd J.R. Relationship between interfacial adhesion and electromigration in Cu metallization // J. Appl. Phys. 2003. V. 93. No. 3. P. 1417–1421.
- Lloyd J.R., Lane M.W., Liniger E.G., Hu C.-K., Shaw T.M., Rosenberg R. Electromigration and adhesion // IEEE Transac. on Device and Materials Reliability. 2005. V. 5. No. 1. P. 113–118.
- 6. *Makhviladze T.M., Sarychev M.E.* Effect of point defects on the electromigration rate at the interface of

МИКРОЭЛЕКТРОНИКА том 53 № 3 2024

joined materials // Mikroelektronika. 2020. V. 49. No. 6. P. 450-458. DOI: 10.31857/S0544126920050051.

- Makhviladze T.M., Sarychev M.E. Effect of lattice defects on the electromigration-induced instability of the interface between joined conductive materials // Mikroelektronika. 2022. V. 51. No. 6. P. 443–451. DOI: 10.1134/S1063739722700160.
- Goldshtein R.V., Makhviladze T.M., Sarychev M.E. Influence of impurities on the work of separation along the interface of joined materials // Poverkhnost'. Rentgenovskie, Sinkhrotronnye i Neitronnye Issledovaniya. 2009. No. 12. P. 73–78. DOI: 10.1134/ S1027451009060196.
- Makhviladze T.M., Sarychev M.E. Instability of interfaces between conducting layers of integrated circuit elements under the influence of electric current and mechanical stresses // Physicheskya Mesomekhanika. 2022. V. 25. No. 1. P. 26–34. DOI: 10.55652/1683-805X_2022_25_1_26.
- 10. *Ziman J.M.* Principles of the theory of solids. Moscow: Fizmatlit, 1988. 416 p.
- Bernasconi R., Magagnin L. Ruthenium as diffusion barrier layer in electronic interconnects // J. Electrochem. Soc. 2019. V. 166. No. 1. P. D3219–D3225.
- Makhviladze T.M., Sarychev M.E. Influence of point defects on the initiation of electromigration in an impurity conductor // Mikroelektronika. 2021. V. 50. No. 5. P. 376–383. DOI: 10.1134/S1063739721040077.

- Goldstein R.V., Makhviladze T.M., Sarychev M.E. Modeling the Kinetics of Lattice Defect Adsorption into the Interface of Joint Materials // Poverkhnost'. Rentgenovskie, Sinkhrotronnye i Neitronnye Issledovaniya. 2011. No. 8. P. 5–11. DOI: 10.1134/ S1027451011080064.
- Babichev A.P., Babushkina N.A., Bratkovskii A.M. et al. Fizicheskie velichiny: Spravochnik (Handbook of Physical Quantities), Grigor'ev I.S. and Melikhov E.Z., Eds., Moscow: Energoatomizdat, 1991.