Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2021. Т. 24, № 4. С. 242—247. DOI: 10.17073/1609-3577-2021-4-242-247

УДК 621.3.049.771.12

Учет пористости материала в модели временного пробоя диэлектрика в системе металлизации интегральных схем

© 2021 г. А. А. Орлов^{1,2,,,} Е. А. Ганыкина^{1,2}, А. А. Резванов^{1,2}

¹ АО «НИИ молекулярной электроники», ул. Акад. Валиева, д. 6, стр. 1, Москва, Зеленоград, 124460, Россия

² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер., д. 9, Долгопрудный, Московская обл., 141707, Россия

⊠Автор для переписки: orlov.aa@phystech.edu

Аннотация. В работе выполнено имитационное моделирование процессов диффузии ионов меди в low–k диэлектрик между двумя близлежащими медными линиями. Получено, что увеличение времени диффузии иона в материале с пористостью 30 %, радиусом пор 1 нм (для входных параметров, указанных в статье) за счет увеличения диффузионного пути можно оценить в 16 %. При этом совместный учет эффекта увеличения электрического поля на краях пор и уменьшения энергии активации диффузии приводит к уменьшению времени до пробоя на 26 % относительно плотного материала.

Ключевые слова: low-k диэлектрик, пористость, временной пробой диэлектрика

Для цитирования: Орлов А.А., Ганыкина Е.А., Резванов А.А. Учет пористости материала в модели временного пробоя диэлектрика в системе металлизации интегральных схем. *Известия вузов. Материалы электрон. техники.* 2021; 24(4): 242—247. https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-242-247

Accounting of the porosity of the material in the simulation of the time-dependent dielectric breakdown in the metallization system of integrated circuits

A. A. Orlov^{1,2,,,}, E. A. Ganykina^{1,2}, A. A. Rezvanov^{1,2}

¹*Molecular Electronics Research Institute, JSC,* 6–1 Academician Valieva Str., Moscow, Zelenograd 124460, Russia

² Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), 9 Institutskiy Lane, Dolgoprudny, Moscow Region 141701, Russia

Corresponding author: orlov.aa@phystech.edu

Abstract. In this work, simulation modeling of processes of the diffusion of copper ions in low-k dielectric between two neighboring copper lines is performed. It was found that an increase in

the diffusion time of an ion in a material with a porosity of 30% and a pore radius of 1 nm (for the input parameters specified in the work) due to an increase in the diffusion path can be estimated at 16%. Moreover, the combined consideration of the effect of an increase in the electric field at the edges of the pores and a decrease in the diffusion activation energy leads to a decrease in the time to breakdown by 26% relatively dense material.

Keywords: low-k dielectric, porosity, TDDB

For citation: Orlov A.A., Ganykina E.A., Rezvanov A.A. Accounting of the porosity of the material in the simulation of the time-dependent dielectric breakdown in the metallization system of integrated circuits. *Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering.* 2021; 24(4): 242–247. https://doi.org/10.17073/1609-3577-2021-4-242-247

Введение

Временной пробой диэлектрика (Тіте-Dependent Dielectric Breakdown — **TDDB**), согласно международной дорожной карте для устройств и систем (International Roadmap for Devices and Systems — IRDS 2020), является одной из основных проблем, приводящих к отказу сверхбольших интегральных схем (СБИС) [1]. В системе медной металлизации для технологий 90 нм и ниже основной причиной снижения надежности СБИС являются диффузия и дрейф ионов меди в low-k диэлектрик (пористый OSG — диоксид кремния SiO₂, в матрице которого часть связей Si-O замещена связями Si—CH₃ и добавлена искусственная пористость [2]) под действием внешнего электрического поля [3, 4]. Для технологий с проектными нормами 32 нм и ниже обычно рассматривается временной пробой диэлектрика между двумя близлежащими металлическими линиями (Intermetal Dielectric -**IMD**), так как толщина IMD значительно меньше, чем толщина диэлектрика, разделяющего уровни системы металлизации.

Стоит отметить, что временной пробой диэлектрика устанавливает ограничение на минимальное пространство между соседними линиями для определенного low-k материала, вызывая замедление масштабирования значения диэлектрической проницаемости.

Описание модели расчета временного пробоя пористого low-k диэлектрика

Одной из перспективных моделей для оценки времени до пробоя пористого low-k диэлектрика является модель, основанная на расчете изменения концентрации ионов металла на границе межслойный диэлектрик/low-k диэлектрик [5, 6]. Причиной TDDB в этой модели полагается формирование проводящего слоя ловушек, соединяющего близлежацие металлические линии, что впоследствии приводит к существенному увеличению тока. Ловушки являются центрами локализации туннелирующих электронов из электродов, и расстояние между ними определяется как $r_{i,j} = C(x,y,t)^{-1/2}$ [6]. Таким образом, наибольшее расстояние между ловушками соответствует минимальной концентрации ионов меди (C^{\min}) в слое диэлектрика. Пробой происходит в области максимального расстояния между ловушками при достижении C^{\min} некого порогового значения (например, величины предельной растворимости ионов меди в диэлектрике).

Основными недостатками описанной в указанных работах модели являются отсутствие явного учета пористости и размера пор low-k диэлектрика в диффузионно-дрейфовом уравнении движения ионов металла в материале, а также ограниченный температурный диапазон. Далее в работе будут рассмотрены положения, позволяющие ввести в указанную модель параметры пористости low-k диэлектрика.

Расчет временного пробоя пористого low-k диэлектрика

Схематичное изображение моделируемой 2D системы представлено на рис. 1 (требуемые входные параметры для расчета времени до пробоя представлены вверху рисунка; рассматривается движение ионов меди только в слое диэлектрика).

Нормированную (на величину растворимости ионов меди в диэлектрике) минимальную концентрацию ионов $C_{\rm norm}^{\rm min}$ можно определить, исходя из уравнения диффузии и дрейфа ионов меди

Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на III-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 25–27 октября 2021 г.

^{© 2021} National University of Science and Technology MISiS.

This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (CC-BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original author and source are credited.



в электрическом поле (1) и граничными условиями на электродах (2) [7].

$$\frac{\partial C_{\text{norm}}}{\partial t} = D\Delta C_{\text{norm}} - qDE \frac{\nabla C_{\text{norm}}}{k_{\text{B}}T};$$
(1)

$$C_{\text{norm}}(x=0) = C_{\text{norm}}(x=d) = 1,$$
 (2)

Для расчета изменения входных параметров в модели оценки времени до пробоя диэлектрика при введении пористости в качестве плотного материала будет рассмотрен диоксид кремния SiO₂. Предположим, что введение пористости в плотный SiO₂ будет имитировать пористый OSG low-k диэлектрик. Данное приближение в отношении пористого OSG low-k диэлектрика обусловлено тем, что метильные CH₃ группы преимущественно расположены на стенках пор. Дополнительно, не рассматривается движение ионов меди внутри пор. В упрощенной модели, под



- Рис. 2. Изменение диффузионного пути иона меди в материале диэлектрика с введением пористости: *а* — без учета наличия соединений между порами; *б* — с учетом соединений между порами (синяя стрелка (1) —диффузионный путь иона в материале без пор; красные стрелки (2) — направление движение иона в присутствии пористости)
- Fig. 2. Change in the diffusion path of the copper ion in the dielectric material with the introduction of porosity: a — without taking into account the presence of connections between the pores; δ — taking into account connections between pores (blue arrow (1) is diffusion path of an ion in a material without pores; red arrows (2) is direction of ion movement in the presence of porosity)

(5)

порами мы будем понимать сферы, имеющие постоянный радиус, и их соединения между собой, заполненные воздухом. В качестве факторов, влияющих на изменение времени до пробоя диэлектрика с введением пористости, рассматриваются следующие предположения, указанные далее.

С введением пористости в материал диффузионный путь иона увеличивается в $\pi/2$ раз, так как вместо расстояния 2r (диаметр поры, где r — радиус поры) ему необходимо пройти расстояние *πr* (половину длины дуги поры). Пояснения представлены на рис. 2.

Полный диффузионный путь L^* иона в материале пористого диэлектрика можно представить следующим образом:

$$L^* = VS_{\rm p} + (1 - V)S_{\rm m},\tag{3}$$

где V — значение пористости материала; S_p — часть диффузионного пути на краях пор; S_m — часть диффузионного пути в материале (см. рис. 2, *a*).

Таким образом, диффузионный путь иона в материале с пористостью 30 % и радиусом пор 1 нм относительно диффузионного пути L в непористом диэлектрике равен:

$$L^{*} = 0.3 \frac{\pi}{2} L + 0.7 L = 1.17 L.$$
(4)

Дополнительно, в предположении, что при величине пористости $V \approx 30$ % и радиусе пор 1 нм геометрические размеры соединения можно примерно оценить как 0,1×4,5 нм² увеличение диффузионного пути (с учетом поправки на сглаженность траектории движения иона меди) составляет (см. рис. 2, б):



с пористостью 30 %, радиусом пор 1 нм и приложенной разностью потенциалов 3,63 В при толщине 50 нм Fig. 3. Distribution of the electric field in a SiO₂ material with a porosity of 30%, a pore radius of 1 nm and an applied potential difference of 3.63 V at a thickness of 50 nm

При введении пористости в материал происходит увеличение напряженности внешнего электрического поля на краях пор относительно величины поля в плотном материале. На рис. 3 приведено моделирование распределения электрического поля в материале SiO₂ с пористостью 30 %, радиусом пор 1 нм и приложенной разностью потенциалов 3,63 В при толщине 50 нм.

Из рис. 3 видно, что области повышенного электрического на краях пор для материала с пористостью 30 % и радиусом пор 1 нм не перекрываются. Исходя из расчетов, также получено, что область краевого эффекта (область движения иона меди в повышенном электрическом поле) для пор размера порядка единиц нанометров составляет примерно 40 % от половины длины окружности поры.

Заключительным фактором, связанным с введением пористости в материал, рассматривается понижение энергии активации диффузии ионов меди за счет внешнего электрического поля. В работе [8] показано, что величина энергии активации диффузии ионов меди в SiO₂ уменьшается в направлении поля и определяется выражением:

$$E_{\rm a}^* = E_{\rm a} - \frac{qbE}{2},\tag{6}$$

где E_a^* — величина энергии активации диффузии в присутствии внешнего поля; *q* — заряд иона меди; b — величина диффузионного прыжка из одной потенциальной ямы в соседнюю яму (2,2 нм [8]).

В итоге, выражение для расчета коэффициента диффузии с поправкой на изменение энергии активации во внешнем электрическом поле принимает следующий вид:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_{\rm a} - \frac{qbE}{2}}{k_{\rm B}T}\right). \tag{7}$$

Моделирование проводилось в программе COMSOL Multiphysics® методом конечных элементов (процесс расчета подробно описан в [5, 6]) со следующими входными параметрами: V = 30 %, r = 1 нм, разность потенциалов 3,63 В, температура 398 К, энергия активации 0,93 эВ [9], множитель перед экспонентой в законе Аррениуса для коэффициента диффузии 1,68 · 10⁻¹⁴ м²/с [10], расстояние между линиями 50 нм.

Получено, что увеличение времени диффузии иона в материале (с учетом квадратичной зависимости времени диффузии от диффузионной длины [11]) за счет увеличения диффузионного пути можно оценить в 16 %, а совместный учет эффекта увеличения электрического поля на краях пор и уменьшения энергии активации диффузии приводит к уменьшению времени до пробоя на 26 % относительно плотного материала.

Заключение

Проведены оценки влияния явного учета пористости материала на численное значение временного пробоя low-k диэлектрика ионами меди. Получено, что увеличение времени диффузии иона в материале с пористостью 30 %, радиусом пор 1 нм за счет увеличения диффузионного пути можно оценить

1. International technology roadmap for semiconductors (ITRSTM) interconnect. 2020 Edition. https://irds.ieee. org/editions/2020

2. Maex K., Shamiryan D., Iacopi F., Brongersma S.H., Baklanov M.R., Yanovitskaya Z.S. Low dielectric constant materials for microelectronics. *Journal of Applied Physics*. 2003; 93(11): 8793—8841. https://doi.org/10.1063/1.1567460

3. Lloyd J.R., Murray C.E., Ponoth S., Cohen S., Liniger E. The effect of Cu diffusion on the TDDB behavior in a low-k interlevel dielectrics. *Microelectronics Reliability*. 2006; 46(9–11): 1643—1647. https://doi.org/ 10.1016/j.microrel.2006.08.003

4. Патент (РФ) № 2486632 С2, МПК H01L 21/768. Валеев А.С., Красников Г.Я., Гвоздев В.А. Способ изготовления усовершенствованной многоуровневой медной металлизации с применением диэлектриков с очень низкой диэлектрической постоянной (ultra low-k). Заявл.: 20.07.2011; опубл.: 27.06.2013. https://yandex.ru/patents/doc/ RU2486632C2_20130627

5. Huang X., Sukharev V., Qi Z., Kim T., Tan S.X.– D. Physics-based full-chip TDDB assessment for BEOL interconnects. In: *Proc. of the* 53rd Annual Design Automation Conf. (DAC'16). 5 June 2016; 45: 1–6. https://doi. org/10.1145/2897937.2898062

1. International technology roadmap for semiconductors (ITRSTM) interconnect. 2020 Edition. https://irds.ieee. org/editions/2020

2. Maex K., Shamiryan D., Iacopi F., Brongersma S.H., Baklanov M.R., Yanovitskaya Z.S. Low dielectric constant materials for microelectronics. *Journal of Applied Physics*. 2003; 93(11): 8793—8841. https://doi.org/ 10.1063/1.1567460

3. Lloyd J.R., Murray C.E., Ponoth S., Cohen S., Liniger E. The effect of Cu diffusion on the TDDB behavior in a low-k interlevel dielectrics. *Microelectronics Reliability*. 2006; 46(9–11): 1643—1647. https://doi.org/ 10.1016/j.microrel.2006.08.003

4. Patent (RU) No. 2486632 C2, IPC H01L 21/768. Valeev A.S., Krasnikov G.J., Gvozdev V.A. Method for manufacturing of improved multilevel copper metallisation using dielectrics with ultra low dielectric constant (ultra low-k). Appl.: 20.07.2011; publ.: 27.06.2013. (In Russ.). https://yandex.ru/patents/doc/RU2486632C2_201306275

5. Huang X., Sukharev V., Qi Z., Kim T., Tan S.X.–D. Physics-based full-chip TDDB assessment for BEOL interconnects. In: *Proc. of the 53rd Annual Design Automation Conf. (DAC'16)*. June 5, 2016; (45): 1—6. https://doi.org/10.1145/2897937.2898062

в 16 %, а совместный учет эффекта увеличения электрического поля на краях пор и уменьшения энергии активации диффузии приводит к уменьшению времени до пробоя на 26% относительно плотного материала. В дальнейшем планируется провести калибровку полученных результатов на экспериментальных структурах.

Библиографический список

6. Peng S., Zhou H., Kim T., Chen H.–B., Tan S. Physicsbased compact TDDB models for low-k beol copper interconnects with time-varying voltage stressing. *IEEE Transactions* on Very Large Scale Integration (VLSI) Systems. 2018; 26(2): 239—248. https://doi.org/1010.1109/TVLSI.2017.2764880

7. Groove A.S. Physics and technology of semiconductor devices. NY, USA: Wiley & Sons Inc.; 1991. 388 p.

8. Hwang S.–S., Jung S.–Y., Joo Y.–C. The electric field dependence of Cu migration induced dielectric failure in interlayer dielectric for integrated circuits. *Journal of Applied Physics*. 2007; 101(7): 074501. https://doi.org/10.1063/1.2714668

9. Achanta R.S., Gill W.N., Plawsky J.L. Predicting the lifetime of copper/barrier/dielectric systems: Insights for designing better barriers for reducing copper ion drift/diffusion into the dielectric. *Journal of Applied Physics*. 2009; 106(7): 074906. https://doi.org/10.1063/1.3238517

10. Shacham–Diamand Y., Dedhia A., Hoffstetter D., Oldham W.G. Copper transport in thermal SiO₂. Journal of the Electrochemical Society. 1993; 140(8): 2427—2432. https://doi.org/10.1149/1.2220837

11. Kuo Y.-L., Lee H.-H., Lee C., Lin J.-C., Shue S.L., Liang M.-S., Daniels B.J. Diffusion of copper in titanium zirconium nitride thin films. *Electrochemical and Solid–State Letters*. 2004; 7(3): C35—C37. https://doi.org/10.1149/1.1644355

References

6. Peng S., Zhou H., Kim T., Chen H.–B., Tan S. Physics– based compact TDDB models for low–k beol copper interconnects with time–varying voltage stressing. *IEEE Transactions* on Very Large Scale Integration (VLSI) Systems. 2018; 26(2): 239—248. https://doi.org/1010.1109/TVLSI.2017.2764880

7. Groove A.S. Physics and technology of semiconductor devices. NY, USA: Wiley & Sons Inc.; 1999. 388 p.

8. Hwang S.–S., Jung S.–Y., Joo Y.–C. The electric field dependence of Cu migration induced dielectric failure in interlayer dielectric for integrated circuits. *Journal of Applied Physics*. 2007; 101(7): 074501. https://doi.org/10.1063/1.2714668

9. Achanta R.S., Gill W.N., Plawsky J.L. Predicting the lifetime of copper/barrier/dielectric systems: Insights for designing better barriers for reducing copper ion drift/diffusion into the dielectric. *Journal of Applied Physics*. 2009; 106(7): 074906. https://doi.org/10.1063/1.3238517

10. Shacham–Diamand Y., Dedhia A., Hoffstetter D., Oldham W.G. Copper transport in thermal SiO₂. Journal of the Electrochemical Society. 1993; 140(8): 2427–2432. https://doi.org/10.1149/1.2220837

11. Kuo Y.-L., Lee H.-H., Lee C., Lin J.-C., Shue S.L., Liang M.-S., Daniels B.J. Diffusion of copper in titanium zirconium nitride thin films. *Electrochemical and Solid–State Letters*. 2004; 7(3): C35—C37. https://doi.org/10.1149/1.1644355

Информация об авторах / Information about the authors

Орлов Андрей Алексеевич — младший научный сотрудник; АО «НИИ молекулярной электроники», ул. Акад. Валиева, д. 6, стр. 1, Москва, Зеленоград, 124460, Россия; Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер., д. 9, Долгопрудный, Московская обл., 141707, Россия; e-mail: aorlov@niime.ru

Ганыкина Екатерина Андреевна — научный сотрудник; АО «НИИ молекулярной электроники», ул. Акад. Валиева, д. 6, стр. 1, Москва, Зеленоград, 124460, Россия; Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер., д. 9, Долгопрудный, Московская обл., 141707, Россия; e-mail: eganykina@niime.ru

Резванов Аскар Анварович — канд. физ.-мат. наук, начальник лаборатории; АО «НИИ молекулярной электроники», ул. Акад. Валиева, д. 6, стр. 1, Москва, Зеленоград, 124460, Россия; Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Институтский пер., д. 9, Долгопрудный, Московская обл., 141707, Россия; https://orcid.org/0000-0002-1677-9122; e-mail: arezvanov@ niime.ru Andrey A. Orlov — Junior Researcher; Molecular Electronics Research Institute, JSC, 6–1 Acad. Valieva Str., Moscow, Zelenograd 124460, Russia; Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), 9 Institutskiy Lane, Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia; e-mail: aorlov@niime.ru

Ekaterina A. Ganykina — Researcher; Molecular Electronics Research Institute, JSC, 6–1 Acad. Valieva Str., Moscow, Zelenograd 124460, Russia; Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), 9 Institutskiy Lane, Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia; e-mail: eganykina@niime.ru

Askar A. Rezvanov — Cand. Sci. (Phys.–Math.), Head of the Laboratory; Molecular Electronics Research Institute, JSC, 6–1 Acad. Valieva Str., Moscow, Zelenograd 124460, Russia; Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), 9 Institutskiy Lane, Dolgoprudny, Moscow Region, 141701, Russia; https://orcid.org/0000-0002-1677-9122; e-mail: arezvanov@niime.ru

Поступила в редакцию 24.12.2021; поступила после доработки 12.01.2022; принята к публикации 28.01.2022 Received 24 December 2021; Revised 12 January 2022; Accepted 28 January 2022