

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

УДК 530.145.6

### ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ НА ВОЗНИКНОВЕНИЕ ЭЛЕКТРОМИГРАЦИИ В ПРОВОДНИКЕ С ПРИМЕСЬЮ

© 2021 г. Т. М. Махвиладзе<sup>а</sup>, М. Е. Сарычев<sup>а</sup> \*

<sup>а</sup>Физико-технологический институт им. К.А. Валиева Российской академии наук,  
Нахимовский проспект, 36/1, Москва, 117218 Россия

\*E-mail: sarych@yandex.ru

Поступила в редакцию 07.12.2020 г.

После доработки 15.01.2021 г.

Принята к публикации 21.01.2021 г.

Развита модель двухкомпонентной электромиграции в твердотельном проводнике с примесью замещения (сплав типа твердого раствора замещения). Ранее предложенный подход к описанию этого процесса, использующий методы неравновесной термодинамики, в настоящей работе обобщен с целью учета внутренних механических напряжений, возникающих вследствие массопереноса в системе. Исследована зависимость критической длины электромиграции от эффектов, обусловленных взаимодействием (корреляцией) потоков атомов проводника и примеси. Детально рассмотрены практически важные случаи, когда процессы электромиграции превалируют в объеме проводника или в интерфейсе между проводником и защитным диэлектриком. Проанализировано влияние точечных кристаллических дефектов в диэлектрике на величину критической длины электромиграции в интерфейсе. Даны оценки величины предсказанных эффектов влияния примесей замещения на электромиграцию собственных ионов проводника. Показано, что в случае электромиграции в интерфейсах корреляционными эффектами влияния примеси замещения (вплоть до фактической блокировки электромиграции атомов проводника) можно управлять путем введения неравновесных точечных дефектов в слой защитного диэлектрика.

DOI: 10.31857/S0544126921040074

#### 1. ВВЕДЕНИЕ

Определяющим фактором для функционирования и надежности нанометровых ИС во многом является качество межсоединений, в частности, элементов металлизации. С уменьшением размеров требования к надежности резко ужесточаются, критически влияя на производительность и стоимость ИС; актуальность исследований надежности межсоединений и методов ее повышения в последние годы резко возросла. Необходимость создания более плотноупакованных многоуровневых структур, обуславливая возрастающую актуальность проблемы надежности элементов нано- и микроэлектроники, в свою очередь определяет необходимость углубления теории и улучшения моделирования процессов, ведущих к их разрушению [1–3].

Среди этих процессов центральное место занимает электромиграция вакансий и ионов [1, 2], определяющая деградацию элементов металлизации. Разрыв микропроводников под действием электромиграции происходит вследствие накопления вакансий в некоторых местах проводника, определяемых неоднородностями его поликристаллической структуры или его конструкцион-

ными особенностями, с последующим зарождением и развитием в этих местах микрополостей.

Одним из активно исследуемых способов уменьшения нежелательной электромиграции является введение примесей замещения, которые должны затруднять диффузию собственных ионов проводника (см., например, [1, 4]). В частности, для алюминиевой металлизации уже довольно давно предлагалось использовать примесь меди (Cu), а для медной – олова (Sn) [1]. Однако применение подобного рода примесей осложнялось тем, что они сами подвержены электромиграции. Это делает особенно актуальным моделирование процессов электромиграции двухкомпонентных систем.

В настоящей работе исследуется электромиграция ионов проводника и содержащейся в нем примеси замещения (двухкомпонентная электромиграция). С этой целью проведено обобщение подхода, предложенного в работе [5], и сформулирована полная система кинетических уравнений, описывающая распределение ионов проводника и примеси с учетом не только взаимного влияния их потоков, но и действия внутренних механических напряжений, возникающих в системе вследствие массопереноса. В рамках развиваемой теории рассмотрено влияние примеси на

критическую длину электромиграции, то есть на минимальную длину проводника, начиная с которой при данной плотности тока процесс электромиграции оказывается возможным вследствие того, что поток атомов, возникающий под действием электронного ветра становится больше обратного потока (*back flow*), вызванного градиентом механических напряжений [6].

В рамках предложенного описания анализируется двухкомпонентная электромиграция (атомов проводника и примеси замещения) в металлизации типа медной, когда основной вклад в электромиграцию вносит граница (интерфейс) между проводником и слоем покрывающего его защитного диэлектрика [7]. Используя полученные ранее результаты по моделированию взаимосвязи прочностных свойств интерфейсов с величиной энергии активации электромиграции [8], проведен анализ влияния точечных кристаллических дефектов в объеме диэлектрика на величину критической длины электромиграции атомов проводника. Выполнены оценки наиболее существенных и практически важных из рассмотренных эффектов, показывающие, в частности, что путем введения неравновесных точечных дефектов в слой защитного диэлектрика можно управлять корреляционными эффектами влияния примеси замещения на электромиграцию собственных ионов проводника вплоть до ее фактической блокировки.

## 2. ФОРМУЛИРОВКА МОДЕЛИ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ЭЛЕКТРОМИГРАЦИИ; ОБЩИЕ СООТНОШЕНИЯ

Рассмотрим массоперенос, возникающий при протекании достаточно сильного электрического

тока через металлический проводник, содержащий в качестве примеси замещения атомы другого металла (твердотельный раствор замещения). В такой системе, представляющей двухкомпонентный сплав, под действием электронного ветра должен иметь место процесс электромиграции как атомов (ионов) проводника, так и атомов примеси.

Обобщая подход, предложенный в работе [5] и использующий методы неравновесной термодинамики, при вакансионном механизме перемещения атомов будем описывать кинетику совместной электромиграции, включающую взаимное влияние потоков атомов проводника и примеси друг на друга, системой дрейфово-диффузионных уравнений, в которых дополнительно учитываются обратные потоки (*back flow*), вызванные возникновением механических напряжений в проводнике, обусловленных процессом массопереноса и релаксацией объема вакансий [2]. В связи с этим для полного описания в систему необходимо также включить уравнения пространственно-временного изменения компонент тензора механических напряжений и концентрации вакансий.

Для простоты в настоящей работе ограничимся рассмотрением одномерного случая, рассматривая проводник в виде однородного плоского слоя (см., например, [2, 9]). Тогда обратные потоки, уравнения кинетики внутренних механических напряжений и распределения концентрации вакансий можно записать в форме, полученной в [2]. Таким образом, в рамках сформулированных модельных представлений полная замкнутая система уравнений совместной двухкомпонентной электромиграции имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_1}{\partial t} &= D_1 \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} + \frac{L_{1b}}{C_b} (kT) \frac{\partial^2 C_b}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left[ L_{11} Z_1^* \rho j + L_{1b} Z_b^* \rho j - D_1 \frac{f_V \Omega_1 C_1}{kT} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right] \equiv - \frac{\partial}{\partial x} J_1, \\ \frac{\partial C_b}{\partial t} &= D_b f_b \frac{\partial^2 C_b}{\partial x^2} + \frac{L_{b1}}{C_1} (kT) \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} - \\ &- \frac{\partial}{\partial x} \left[ L_{bb} Z_b^* \rho j + L_{b1} Z_1^* \rho j - C_b \frac{f_V \Omega_1 D_b f_b}{kT} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right] \equiv - \frac{\partial}{\partial x} J_b, \\ \frac{\partial \sigma}{\partial t} &= B \Omega_1 \left[ -f_V \frac{\partial J_V}{\partial x} + (1 - f_V) \frac{C_V - C_V^{(e)}}{\tau_s} \right], \\ \frac{\partial C_V}{\partial t} &= - \frac{\partial J_V}{\partial x} - \frac{C_V - C_V^{(e)}}{\tau_s}, \quad J_V = -(J_1 + J_b), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $x$  – координата вдоль проводника,  $t$  – время,  $0 \leq C_1, C_b \leq 1$  – безразмерные концентрации (доли) ионов растворителя (1), т.е. металла проводника, и растворимого вещества (b), т.е. примеси замещения;  $C_V$  – концентрация вакансий в про-

воднике;  $D_1, D_b$  – коэффициенты диффузии в проводнике ионов проводника и примеси соответственно;  $Z_1^*, Z_b^*$  – эффективные заряды ионов проводника и примеси,  $\sigma = \frac{1}{3}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz})$  –

сферическая часть тензора  $\sigma_{ik}$  механических напряжений, возникающих вследствие электромиграционного переноса вещества проводника,  $\Omega_1$  – удельный объем, приходящийся на один атом в материале проводника,  $\rho$  – удельное сопротивление проводника,  $f_V$  – коэффициент релаксации вакансий в матрице проводника,  $j$  – плотность электрического тока,  $\tau_s$  – характерное время жизни вакансий относительно процессов генерации/аннигиляции, если их концентрация, соответственно, меньше или больше, чем равновесное значение  $C_V^{(e)}$  [2, 9];  $L_{11}$ ,  $L_{bb}$ ,  $L_{b1}$  и  $L_{1b}$  – феноменологические кинетические коэффициенты (Онзагера), причем недиагональные коэффициенты  $L_{1b}$  и  $L_{b1}$  описывают так называемый эффект вакансионного потока [5], т.е. взаимное влияние потоков атомов проводника и примеси друг на друга за счет обмена вакансиями при электромиграции;  $f_c$  – фактор корреляции, учитывающий влияние указанного эффекта на диффузионную способность атомов примеси ( $D_b f_c = D_b^*$  – значение коэффициента диффузии, получаемое в

экспериментах по электромиграции соответствующих меченных атомов [5]);  $J_1$ ,  $J_b$  и  $J_V$  – полные диффузионно-дрейфовые потоки атомов проводника, атомов примеси и вакансий, соответственно.

Отметим, что для недиагональных кинетических коэффициентов выполняется равенство  $L_{1b} = L_{b1}$  (теорема Онзагера), а их величины должны определяться типом кристаллической решетки проводника и частотами перескоков атомов проводника и примеси в ближайшую вакансию [5]. В случае низколегированных сплавов ( $C_b \ll C_1$ ), который рассматривается далее, для диагональных коэффициентов имеют место соотношения [5, 10]:

$$L_{11} \cong C_1 D_1 / kT, \quad L_{bb} \cong C_b D_b f_c / kT. \quad (2)$$

Согласно уравнениям (1) вклады в потоки ионов проводника и примеси, возникающие под действием электрического тока  $j$  и градиента механического напряжения  $\sigma$ , даются следующими выражениями:

$$\begin{aligned} J_1^* &= L_{11} Z_1^* \rho j + L_{1b} Z_b^* \rho j - C_1 \frac{D_1 f_V \Omega_1}{kT} \frac{\partial \sigma}{\partial x}, \\ J_b^* &= L_{bb} Z_b^* \rho j + L_{b1} Z_1^* \rho j - C_b \frac{f_V D_b f_c \Omega_1}{kT} \frac{\partial \sigma}{\partial x}. \end{aligned} \quad (3)$$

Эти величины определяют дрейфовые скорости  $V_{1,b} = J_{1,b}^* / C_{1,b}$  ионов проводника (1) и примеси (b), возникающие в электрическом поле и поле механических напряжений.

### 3. КРИТИЧЕСКАЯ ДЛИНА ЭЛЕКТРОМИГРАЦИИ В СЛУЧАЕ ПРОВОДНИКА С ПРИМЕСЬЮ ЗАМЕЩЕНИЯ

Из экспериментов известно, что при заданной плотности тока  $j$  электромиграция имеет место только в том случае, если длина проводника оказывается больше некоторой пороговой (критической) величины  $l_c$  [6]. Соответственно, при заданной длине  $l$  она начинается только, если  $j > j_c$  – критической плотности тока [6]. Необходимость выполнения этих условий обусловлена тем, что имеет место обратный поток вакансий (ионов) вследствие появления градиента механического

напряжения (см. выражения (3)) [6]. Поэтому в рамках рассматриваемой модели практический интерес представляет собой исследование изменения критической длины проводника при двухкомпонентной электромиграции атомов проводника и примеси в условиях взаимной корреляции их потоков.

Рассматривая далее случай разбавленного твердотельного раствора (низколегированный сплав), то есть считая, что  $C_b \ll C_1 < 1$ , в линейном по  $C_b$  приближении имеем

$$D_1 = D_1(0)(1 + \beta C_b), \quad (4)$$

где  $\beta$  – некоторый коэффициент,  $D_1(0)$  – коэффициент диффузии атомов проводника в отсутствие примеси, и для дрейфовой скорости  $V_1$  атомов проводника, которая определяется из соотношения  $V_1 = J_1^* / C_1$ , из (3) и (4) получим:

$$\begin{aligned} V_1 &= V_1(0) - D_1(0) \frac{f_V \Omega_1}{kT} \frac{\partial \sigma}{\partial x} + \\ &+ C_b \left\{ V_1(0) \left( \beta + \frac{D_b f_b}{C_1 D_1(0)} \frac{Z_b^* L_{1b}}{Z_1^* L_{bb}} \right) - \beta \frac{D_1(0) f_V \Omega_1}{kT} \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right\}, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $V_1(0) = D_1(0)Z_1^* \rho j / kT$  – дрейфовая скорость  $V_1$ , возникающая только под действием тока и в отсутствие примеси.

Поскольку полное решение системы уравнений (1) является достаточно сложной и громоздкой задачей, в качестве первого шага ограничимся далее приближением, в котором распределение механических напряжений  $\sigma$  вдоль проводника считается известным (см. также [6]). Отметим, что такое описание является точным для учета действия механических нагрузок, вызванных внешним источником, например, остаточных напряжений, вызванных технологией изготовления металлизации.

В этом приближении заменим в (5) градиент механических напряжений на среднюю по длине проводника величину [6], положив  $\partial\sigma/\partial x \cong \Delta\sigma/\ell$ , где  $\ell$  – длина проводника,  $\Delta\sigma$  – разность механического напряжения на концах проводника (между анодом и катодом), возникающая за счет транспорта атомов к аноду ( $Z_{1,b}^* < 0$ ), а вакансий – к катоду. Вводя затем критическую длину  $\ell_c = f_V \Omega_1 \Delta\sigma / |Z_1^* \rho j|$  проводника без примеси, из (5) получим

$$V_1 = V_1(0) \left\{ 1 - \frac{\ell_c (1 + \beta C_b)}{\ell} + C_b \gamma \right\}, \quad (6)$$

$$\text{где } \gamma = \beta + \frac{D_b f_b Z_b^* L_{1b}}{C_1 D_1(0) Z_1^* L_{bb}}.$$

Условием, определяющим критическую длину проводника, является обращение дрейфовой скорости ионов, то есть скорости электромиграции, в нуль. Тогда критическая длина  $\ell_1$  проводника, необходимая для возникновения электромиграционного потока его собственных атомов, определяется из условия  $V_1 = 0$  и соотношения (6):

$$\ell_1 = \ell_c \frac{1 + \beta C_b}{1 + \gamma C_b}. \quad (7)$$

Из (6) видно, что при  $\ell > \ell_1$  имеет место  $V_1 > 0$ , а в противоположном случае –  $V_1 < 0$ , то есть электромиграции отсутствует.

Аналогично, записывая из (3) дрейфовую скорость  $V_b = J_b^* / C_b$  и используя условие  $V_b = 0$ , для

критической длины проводника  $\ell_b$  относительно электромиграции атомов примеси, получим:

$$\ell_b = \ell_p / \left( 1 + Z_1^* L_{1b} / Z_b^* L_{bb} \right), \quad (8)$$

где  $\ell_p = f_V \Omega_1 \Delta\sigma / |Z_b^* \rho j|$  – пороговая длина электромиграции атомов примеси в матрице проводника без учета эффекта влияния электромиграции его собственных ионов, выраженного в кинетическом коэффициенте  $L_{1b}$ .

Отметим следующие особенности полученных величин (7) и (8). Во-первых, вследствие эффектов корреляции потоков  $J_1$  и  $J_b$ , критические длины  $\ell_1$  и  $\ell_b$  теперь зависят от коэффициентов диффузии ионов проводника и примеси в отличие от соответствующих длин  $\ell_c$  и  $\ell_p$ , имеющих место в отсутствие корреляции. В случае соотношения (8) это реализуется через коэффициент  $L_{bb}$ , а в случае (7) величина  $D_a(0)$  входит явно. Во-вторых, в силу этого же обстоятельства в выражении (7) для  $\ell_1$  знаменатель (в отличие от числителя) уже не представляет собой просто разложения по малой концентрации  $C_b$ . Величина  $\gamma C_b$  может оказаться не малой за счет второго слагаемого в выражении для коэффициента  $\gamma$ , которое пропорционально  $L_{1b}$ , т.е. обусловлено эффектами взаимной корреляции потоков  $J_1$  и  $J_b$ .

Применим далее полученные выше соотношения для оценки возможности возникновения электромиграции в объеме разбавленного сплава Al(Cu), представляющего практический интерес для повышения надежности проводящих микроэлементов на основе алюминия. Из выражения (7), прежде всего, следует, что  $\ell_1$  отличается от критической длины  $\ell_c$  проводника без примеси. Характер этого отличия (величина  $\ell_1$  больше или меньше величины  $\ell_c$ ) зависит, в первую очередь, от значений величин коэффициентов  $\beta$  и  $\gamma$  и, в частности, от их знаков.

Согласно экспериментальным и расчетным данным работы [5] при миграции примесей в плоскости (111) гранцентрированной кубической решетки для параметров, входящих в полученные выше выражения, имеют место следующие соотношения:

$$\frac{L_{1b}}{L_{bb}} = \frac{-2 + \varphi \omega_3 / \omega_1}{1 + (7/2 F) \omega_3 / \omega_1}, \quad \beta = -18 + 4 \frac{\omega_4}{\omega_0} \left( \frac{\omega_1}{\omega_3} + \frac{7}{2} \right), \quad (9)$$

где  $\omega_0, \omega_1, \omega_3, \omega_4$  – частоты прыжков атомов проводника в соседнюю с ними вакансию, когда примесный атом также является соседним с этой вакансией ( $\omega_1, \omega_3$ ) и когда он не является соседним

( $\omega_0, \omega_4$ );  $\varphi, F$  – некоторые слабо меняющиеся функции от  $\omega_4/\omega_0$ , причем  $\varphi, F \sim 1$  [5];  $\omega_2$  – частота перескока атома примеси в соседнюю вакансию.

Так, в случае примеси Cu в алюминии (сплав Al(Cu)) по данным работы [5], включающим и данные о характерных значениях частот  $\omega_0, \omega_1, \omega_2, \omega_3$  и  $\omega_4$ , имеем следующие оценки для параметров, входящих в выражения (7) и (8):

$$L_{1b}/L_{bb} \cong -0.4, \quad \beta \cong 100, \quad D_b f_b / D_a(0) \approx 0.9, \\ Z_b^* / Z_1^* \sim 0.4, \quad C_1 \sim 1. \quad (10)$$

Отметим, что для всех рассмотренных в [5] твердотельных растворов имеют место отрицательные значения параметра  $L_{1b}/L_{bb}$ , причем  $L_{1b}/L_{bb} \approx -(0.3-1.4)$ . Из этих оценок следует, что в (7)  $0 < \gamma < \beta$ . Согласно (10), для сплава Al(Cu) отличие  $\gamma$  от  $\beta$  мало ( $\beta - \gamma \approx 0.1 \ll \beta$ ). Для других сплавов на основе алюминия Al(Zn) и Al(Mg) по данным [5]  $\beta - \gamma \approx 4-10$  и  $\beta \approx 20$ , т.е. влияние корреляции потоков сказывается значительно сильнее.

Из оценок (10) и выражения (7) следует, что примесь меди (как и некоторых других металлов) за счет эффектов корреляции потоков может увеличивать пороговую длину электромиграции атомов алюминия ( $\ell_1 > \ell_c$ ), т.е. затруднять ее. Этот результат находится в согласии с экспериментальными данными по электромиграции в Al(Cu) металлизации [11].

При тех же оценках (10) имеем, что в выражении (8) для пороговой длины  $\ell_p$  электромиграции атомов меди в алюминиевом проводнике знаменатель близок к нулю, то есть  $\ell_p$  может быть очень большой, и, следовательно, эффекты корреляции сильно ограничивают массоперенос медной примеси. В то же время из экспериментов известно, что в Al(Cu) металлизации атомы меди обладают достаточно высокой электромиграционной подвижностью [11]. Это может быть связано, например, с тем, что в реальных алюминиевых поликристаллических проводниках электромиграция в основном идет по межзерненным границам, для которых оценки значений параметров в выражениях (7) и (8) могут, вообще говоря, измениться. В частности, результаты работы [12] показывают, что эффективные заряды ионов меди и алюминия в межзеренной границе поликристаллического алюминия в зависимости от текстуры образующих ее зерен и температуры могут оказаться значительно меньше, чем в объеме зерен.

#### 4. СЛУЧАЙ ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ЭЛЕКТРОМИГРАЦИИ ВДОЛЬ ИНТЕРФЕЙСА; ВЛИЯНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ

Применим теперь описание, основанное на системе уравнений (1) и следующих из них соотношений (7), (8), к выяснению особенностей возникновения электромиграции в интерфейсе меж-

ду проводником (материал 1), содержащим в качестве примеси замещения атомы другого металла ( $b$ ), и покрывающим этот проводник защитным диэлектриком (материал 2).

Случай электромиграции в интерфейсе представляет значительный практический интерес, в частности, потому, что он реально имеет место для медной (Cu) металлизации, поскольку в поликристаллическом медном проводнике на этом пути энергия активации дрейфа атомов меди меньше, чем в межзеренных границах и объемах зерен [1]. С целью торможения нежелательного электромиграционного потока в медном проводнике исследовалось добавление (растворение) примеси атомов различных металлов, например, олова (Sb) [1].

Как было показано в экспериментах с медной металлизацией (без примеси), имеющей различные защитные диэлектрические покрытия [7], энергия активации электромиграции атомов меди  $H_{EM}$  оказалась линейно связанной с обратной работой  $W_a$  разделения по интерфейсу проводника и диэлектрика:

$$H_{EM} = \alpha + \chi W_a, \quad (11)$$

где  $\alpha$  и  $\chi$  — положительные константы.

В нашей работе [8] была предложена и развита модель, в которой соотношение (11) было обосновано и получено исходя из того, что в системе типа медной металлизации электромиграция ионов проводника в основном происходит по интерфейсу металл—защитный диэлектрик. Рассматривался случай, когда интерфейс представляет собой плоский слой (бикристаллическая модель). Поскольку электромиграционный поток пропорционален коэффициенту диффузии  $D_1$  ионов проводника (в данном случае имеется в виду диффузия в интерфейсе) [2], то энергия активации электромиграции  $H_{EM} \approx E_D$ , где  $E_D$  — энергия активации соответствующего диффузионного процесса (т.е.  $D_1 \sim \exp(-E_D/kT)$ ). Анализ микроскопического механизма вакансионной диффузии вдоль интерфейса в [8] привел к соотношению (11); там же были получены выражения для параметров  $\alpha$  и  $\chi$  через микрохарактеристики материалов 1 и 2 и интерфейса. В рамках данной модели параметр  $\alpha > 0$  ( $\alpha$  — энергия активации диффузии атомов проводника по свободной поверхности), а  $\chi > 0$  зависит от микрохарактеристик взаимодействия атомов материалов 1 и 2 через интерфейс и дается выражением:

$$\chi = z_l \pi^2 \lambda^2 / 2n_l \delta_c^2,$$

где  $z_l$  — число ближайших соседей (координационное число) иона из граничной плоскости материала 1 в граничной плоскости материала 2;  $\lambda$  — усредненное изменение расстояния между ионом

проводника в граничной плоскости материала 1 при его попадании в седловую точку энергетического барьера, отделяющего его от вакансии в соседнем узле этой плоскости, и его ближайшими соседями в граничной плоскости материала 2;  $n_I$  – количество связей между атомами граничных плоскостей материалов 1 и 2 в интерфейсе в расчете на единицу его площади;  $\delta_c$  – минимальное расстояние между материалами 1 и 2, начиная с которого они могут рассматриваться как разделенные.

В работе [8] с помощью соотношения (11), а также результатов работ [13, 14] по моделированию адгезионной прочности интерфейсов, были найдены и исследованы зависимости  $H_{EM} \approx E_D$  от концентраций неравновесных точечных кристаллических дефектов (атомарные примеси внедрения и замещения, вакансии) в объемах проводника и защитного диэлектрика. Покажем теперь, что развитые в [8] представления позволяют проанализировать, как дефектность материалов может влиять на величину критической длины электромигра-

ции, если она происходит по интерфейсу между проводником, содержащим примесь замещения  $b$ , и покрывающим его диэлектриком.

Для этого заметим, что в данном случае в выражение (7) для критической длины электромиграции атомов проводника  $\ell_1$  входит величина  $D_1(0) \sim \exp(-E_D/kT)$ , т.е. коэффициент их диффузии в интерфейсе в отсутствии атомов примеси  $b$ . Отсюда следует, что при анализе влияния точечных дефектов на величину энергии активации  $E_D$  можно использовать соотношение (11) и другие результаты модели, развитой в [8].

Рассмотрим, например, в качестве объемных точечных дефектов атомарную примесь внедрения в материалах, образующих интерфейс. Согласно результатам [8] и соотношению (11), энергия активации электромиграции (диффузии) собственных ионов проводника в интерфейсе  $H_{EM} \approx E_D$ , как функция концентраций атомов примеси внедрения в соединенных материалах, может быть представлена в виде:

$$H_{EM} \approx E_D(C_1, C_2) = E_D^{(0)} + \chi \sum_{i=1}^2 \frac{kT}{\Omega_i} \left\{ b \ln \left[ \frac{1 + (h_i - 1)C_i}{1 - C_i} \right] - d_i \ln \left[ \frac{1 + (h_{si} - 1)C_i}{1 - C_i} \right] \right\}, \quad (12)$$

где  $C_1$  и  $C_2$  – безразмерные концентрации (доли) атомов примесей внедрения в проводнике и защитном диэлектрике соответственно;  $E_D^{(0)} = E_D(0, 0) = \alpha + \chi W_a^{(0)}$ ,  $W_a^{(0)} = W_a(0, 0)$  – работа разделения в отсутствие этих примесей,  $h_i = K_{ai}/K_{di}$  (безразмерный параметр),  $K_{ai}$ ,  $K_{di}$  – константы скорости процессов адсорбции и десорбции примесей при их обмене между объемом  $i$ -го материала и границей;  $h_{si} = K_{ai}^{(s)}/K_{di}^{(s)}$  (безразмерный параметр);  $K_{ai}^{(s)}$  и  $K_{di}^{(s)}$  – константы скорости процессов адсорбции и десорбции примесных атомов на свободной поверхности  $i$ -го материала ( $d_i$  – толщина приповерхностного слоя  $i$ -го материала, в котором эти процессы происходят);  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$  – удельные объемы, приходящиеся на один атом (молекулу) в материалах 1 и 2, соответственно,  $b$  – ширина интерфейса. Отметим, что в (12) подразумевается,

что концентрации  $C_1$  и  $C_2$  неравновесных примесей определяются внешними источниками и поэтому могут быть равными нулю.

Несомненный интерес представляет вопрос о том, как зависимость  $E_D(C_1, C_2)$ , определяемая выражением (12), может влиять на значения критических длин  $\ell_1$  и  $\ell_b$  электромиграции собственных ионов проводника и ионов примеси замещения в интерфейсе. При этом наибольшее практическое значение имеет, прежде всего, поведение величины  $\ell_1$  (см. (7)), которая ограничивает электромиграцию собственных ионов, являющуюся основным фактором, приводящим к деградации металлизации.

Согласно (7) зависимость  $\ell_1$  от концентрации примеси замещения  $C_b$  определяется соотношением величин и знаков параметров  $\gamma$  и  $\beta$ , причем из (6) следует, что

$$\gamma - \beta = \frac{D_b f_b Z_b^* L_{1b}}{D_1(0) Z_1^* L_{bb}} \sim D_b L_{1b} / C_1 L_{bb} D_1(0) \sim \text{sign}(L_{1b}/L_{bb}) \exp(E_D/kT). \quad (13)$$

При оценке (13) учтено, что для большинства металлов при обычных (порядка комнатных) температурах  $Z_1^*$  и  $Z_b^*$  отрицательны [7, 12], а знак и

величина отношения  $L_{1b}/L_{bb}$  зависят от особенностей кристаллической структуры приграничного слоя проводника в интерфейсе. Кроме того, учтем,

что поскольку в рамках модели [8] интерфейсная электромиграция атомов примеси  $b$  происходит также в приграничном слое проводника, то при  $C_b \ll C_1$  коэффициент диффузии  $D_b$  не связан с обратимой работой разделения интерфейса  $W_a$ .

Ограничимся далее для простоты случаем, когда примесь внедрения введена только в материал 2, т.е.

$$\Delta H_{EM}(C_2) = \Delta E_D(C_2) = \chi k T \frac{1}{\Omega_2} \left\{ b \ln \left[ \frac{1 + (h_2 - 1)C_2}{1 - C_2} \right] - d_2 \ln \left[ \frac{1 + (h_{s2} - 1)C_2}{1 - C_2} \right] \right\}, \quad (14)$$

где  $\Delta H_{EM}(C_2) = \Delta E_D(C_2) = E_D(C_1 = 0, C_2) - E_D^{(0)}$  – добавка к энергии активации диффузии (электромиграции) собственных ионов проводника в интерфейсе, обусловленная примесью внедрения в материале 2.

Из (7), (11), (13) следует, что, если имеет место  $L_{1b}/L_{bb} < 0$  (см. Разд. 3), то увеличение энергии активации диффузии ( $\Delta E_D(C_2) > 0$ ) будет приводить к увеличению величины  $\ell_1$ . Анализ выражения (14) и результаты работы [8] показывают, что уже за счет

в защитный диэлектрик. Отметим, что в этом случае нет необходимости рассматривать возможное непосредственное влияние примеси внедрения на электромиграцию атомов проводника и примеси замещения, которая в интерфейсе происходит в приграничном слое проводника [8]. Тогда, положив в (12)  $C_1 = 0$ , получим

достаточно малых концентраций примеси внедрения в защитном диэлектрике (материале 2) можно сильно уменьшить  $D_1(0)$  и тем самым увеличить  $\ell_1$ . Например, считая далее, что  $C_2 \ll 1$  и  $C_2 h_2, C_2 h_{s2} \gg 1$  [8] и приравнявая для удобства проведения оценок  $\Delta E_D(C_2)$  в (14) к  $\varepsilon E_D^{(0)}$  (где  $\varepsilon$  – численный коэффициент, который можно варьировать, например в интервале  $0 < \varepsilon < 1$ ), получим выражение для оценки  $C_2$  в зависимости от величины  $\varepsilon$ :

$$C_2 = \left( h_{s2}^{d_2/b} / h_2 \right)^{b/(b-d_2)} \exp \left[ \varepsilon E_D^{(0)} \Omega_2 / \chi k T (b - d_2) \right]. \quad (15)$$

Применим соотношение (15) к случаю, когда  $b \sim d_2 \sim |b - d_2|$  и  $b > d_2$ . Положив для определенности  $\lambda \leq \delta_c/2$ ,  $n_I \approx \Omega_2^{-2/3}$ ,  $z_I \sim 1$  и  $b = 3 \text{ \AA}$ ,  $d_2 = 2 \text{ \AA}$ ,  $\Omega_2 \sim \Omega_1 \approx 10^{-29} \text{ м}^3$  [15],  $E_D^{(0)} \approx 1 \text{ эВ}$  [7, 8], при комнатных температурах  $kT \approx 0.025 \text{ эВ}$  из (15) получим следующую оценку  $C_2$  как функцию параметра  $\varepsilon$ :

$$C_2 = \left( h_{s2}^2 / h_2^3 \right) \exp(16\varepsilon). \quad (16)$$

Например, при  $\varepsilon = 0.3$  (т.е.  $\Delta E_D(C_2) = 0.3 E_D^{(0)} \sim 0.3 \text{ эВ}$ ) и, используя полученную в [8] для примеси внедрения оценку  $h_2, h_{s2} \sim 10^8$ , имеем из (16), что концентрация примеси, необходимая для такого увеличения энергии активации, составляет  $C_2 \sim 10^{-6}$ , а при  $\varepsilon = 0.5$  ( $\Delta H_{EM}(C_2) = 0.5 \text{ эВ}$ ) соотношение (16) дает  $C_2 \sim 10^{-5}$ , что согласуется со сделанными выше допущениями относительно соотношения величин  $h_2, h_{s2}$  и  $C_2$ .

Из этих оценок получим, что при комнатных температурах ( $kT \approx 0.025 \text{ эВ}$ ) и  $\varepsilon = 0.3$  ( $\Delta E_D(C_2) \sim 0.3 \text{ эВ}$ ) за счет эффекта, обусловленного присутствием примеси внедрения в защитном диэлектрике, экспоненциальный множитель в правой части соотношения (13) можно увеличить в  $\exp[\Delta E_D(C_2)/kT] \sim 10^5$  раз. Таким образом,

если  $L_{ab}/L_{bb} < 0$  и  $\beta > 0$  (например, как это имело место (см. Разд. 3) в случае сплава Al(Cu)), то при данной оценке и выполнении условия  $|\gamma| C_b < 1$  (что возможно, так как предполагается выполнение соотношения  $C_b \ll C_1 < 1$ ) приходим к выводу, что, комбинируя величины концентраций примесей  $C_2$  в диэлектрике и  $C_b$  в проводнике, можно сделать величину  $\ell_1$  сколь угодно большой.

Полученные оценки показывают, что эффектами корреляции между электромиграционными потоками атомов проводника и растворенной в нем примеси замещения, имеющими место в интерфейсе между проводником и покрывающим его слоем защитного диэлектрика, можно управлять (вплоть до полной блокировки электромиграции атомов проводника) путем введения неравновесных точечных дефектов (например, примеси внедрения) в этот диэлектрик.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе развита модель двухкомпонентной электромиграции атомов твердотельного проводника и примеси замещения. В модели, ранее предложенной в работе [5], подход к описанию таких систем, использующий методы неравновесной термодинамики, обобщен с целью учета

внутренних механических напряжений, возникающих вследствие массопереноса в системе.

Исследована зависимость величины критической длины проводника, необходимой для возникновения электромиграционных потоков каждого из компонентов, от эффектов, обусловленных их воздействием друг на друга (корреляцией потоков атомов проводника и примеси). Получено, в частности, что вследствие указанной взаимной корреляции критическая длина для атомов проводника  $\ell_1$  становится зависящей от коэффициента их диффузии и соответствующего кинетического коэффициента Онзагера  $L_{1b}$ , описывающего влияние потока атомов примеси, вследствие чего возможно выполнение условия  $\ell_1 > \ell_c$ , где  $\ell_c$  – критическая длина проводника относительно электромиграции в отсутствие примеси в нем. Даны оценки для сплава Al(Cu), показавшие, что для этого случая данный эффект коррелирующего действия примеси на условия возникновения электромиграции атомов проводника действительно должен иметь место.

Применяя развитые здесь теоретические представления к исследованию двухкомпонентной электромиграции в интерфейсе между проводником и смежным с ним материалом (например, защитный диэлектрик в случае медной металлизации), проведено исследование влияния точечных кристаллических дефектов на величину критической длины интерфейса при наличии в нем примеси замещения. Показано, что введение в защитный диэлектрик неравновесных дефектов позволяет, за счет влияния этих дефектов на корреляционное воздействие потока примеси, эффективно управлять величиной критической длины электромиграции  $\ell_1$ , которая оказывается функцией концентрации дефектов. Для дефектов в виде атомарной примеси внедрения проведены оценки ее концентрации, необходимой для существенного изменения  $\ell_1$ . Таким образом, в случае электромиграции в интерфейсах корреляционными эффектами влияния примеси замещения можно управлять путем введения неравновесных точечных дефектов (например, примеси внедрения) в слой защитного диэлектрика, затрудняя тем самым нежелательный массоперенос (вплоть до фактической его блокировки).

Результаты работы представляют интерес для улучшения технологии изготовления и повышения надежности функционирования проводящих элементов микро- и нанoeлектронных схем.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФТИАН им. К.А. Валиева РАН Минобрнауки РФ по теме № 0066-2019-0004.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Tu K.N.* Recent advances on electromigration in very-large-scale-integration of interconnects // *J. Appl. Phys.* 2003. V. 94. № 9. P. 5451–5473.
2. *Валиев К.А., Гольдштейн Р.В., Житников Ю.В., Махviladze 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.
3. *Makhviladze T., Sarychev M.* Electromigration theory and its applications to integrated circuit metallization // *Proc. SPIE*, 2010. V. 7521. P. 752117(15).
4. *Zhang W., Yi L., Chang P., Wu J.* A method for AlCu interconnect electromigration performance predicting and monitoring // *Microel. Engineering*. 2008. V. 85. № 3. P. 577–581.
5. *Ho P.S.* Solute effects on electromigration // *Phys. Rev.* 1973. V. B8. № 10. P. 4534–4539.
6. *Blech I.A.* Electromigration in thin aluminum films on titanium nitride // *J. Appl. Phys.* 1976. V. 47. № 4. P. 1203–1210.
7. *Lane M.W., Liniger F.J., Lloyd J.R.* Relationship between interfacial adhesion and electromigration in Cu metallization // *J. Appl. Phys.* 2003. V. 93. № 3. P. 1417–1421.
8. *Махviladze Т.М., Сарычев М.Е.* Влияние точечных дефектов на скорость электромиграции по границе соединенных материалов // *Микроэлектроника*. 2020. Т. 49. № 6. С. 450–458.
9. *Kirchheim R.* Stress and electromigration in Al-lines of integrated circuits // *Acta Metal. Mater.* 1992. V. 40. № 2. P. 309–323.
10. *Manning J.R.* Diffusion kinetics for atoms in crystals. van Nostrand, N.Y. 1968. 300 p.
11. *Hu C.-K., Ho P.S., Small M.B.* Electromigration in Al(Cu) two-level structures: effect of Cu and kinetics of damage formation // *J. Appl. Phys.* 1993. № 2. V. 74. P. 969–979.
12. *Махviladze Т.М., Сарычев М.Е.* Моделирование влияния структуры межзеренной границы на эффективные заряды ионов в процессах электромиграции // *Микроэлектроника*. 2019. Т. 48. № 6. С. 430–438.
13. *Алексеев А.И., Махviladze Т.М., Минушев А.Х., Сарычев М.Е.* Термодинамическая модель влияния атомарных примесей на адгезионную прочность интерфейсов // *Микроэлектроника*. 2011. Т. 40. № 5. С. 325–330.
14. *Гольдштейн Р.В., Махviladze Т.М., Сарычев М.Е.* Влияние примесей на работу отрыва по границе соединенных материалов // *Поверхность*. 2009. № 12. С. 73–78.
15. *Бабичев А.П., Бабушкина Н.А., Братковский А.М. и др.* Физические величины: Справочник / Под ред. Григорьева И.С. и Мелихова Е.З. М.: Энергоатомиздат, 1991. 825 с.