

文章编号 1004-924X(2013)08-2064-07

铜互连兆声清洗中结构损伤预测的有限元分析

黄雅婷^{1*}, 孟春玲¹, 董秀萍¹, 路新春²

(1. 北京工商大学 材料与机械工程学院, 北京 100048;

2. 清华大学 摩擦学国家重点实验室, 北京 100084)

摘要: 尽管用于铜及低介电材料(*low-k* 材料)互连加工的兆声清洗工艺可以提高纳米颗粒的去除率, 但清洗过程中的声波能量会破坏微小器件结构从而导致器件功能失效。本文采用有限元分析法分析和预测了兆声波的破坏作用, 研究了铜及 *low-k* 材料互连结构在兆声清洗过程中的应力分布及变形。基于 ABAQUS 软件, 采用二维有限元模型对循环布线图形其中的一个典型元胞在空化气泡破裂冲击下的应力应变进行分析, 并讨论了它的破坏形式和破坏规律。结果表明, 最大应力集中在铜及 *low-k* 材料键合处将导致 *low-k* 材料分层。当线宽为 22 nm 时, 应力和结构变形达最大值, 分别为 1 379 MPa 和 3.074 nm; 之后随线宽增加最大应力应变值均减小。另外, 兆声频率增大不改变应力应变分布规律, 对应力应变极值影响亦不明显。分析及预测结果与工业实践得到的结果相符。

关键词: 化学机械抛光; 兆声清洗; 铜互连; 有限元分析

中图分类号: TN305 **文献标识码:** A **doi:** 10.3788/OPE.20132108.2064

Finite element analysis of structure failure in Cu interconnect megasonic cleaning

HUANG Ya-ting^{1*}, MENG Chun-ling¹, DONG Xiu-ping¹, LU Xin-chun²

(1. School of Material and Mechanical Engineering,

Beijing Technology and Business University, Beijing 100048, China;

2. State Key Laboratory of Tribology, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

* Corresponding author, E-mail: huangyat@gmail.com

Abstract: Although megasonic cleaning can remove effectively nano particles in the Cu/*low-k* interconnection post-Chemical Mechanic Polishing (post-CMP) cleaning, the megasonic energy in cleaning may also cause extensive damage to microstructures. To predict the damage, the structural deformation and the stress distribution of Cu and *low-k* materials in megasonic cleaning were examined with Finite Element Analysis(FEA). Two-dimensional models were used in analysis of the stress-strain of a typical cell impacted by a cavitation bubble in the circulate wiring pattern and all of the simulations were performed with ABAQUS. The results show that the maximum stress is concentrated in the binding area between Cu and *low-k*, which will result in the delamination of *low-k* materials. When the line width is 22 nm, the stress and deformation reach the largest values by 1 379 MPa and 3.074

收稿日期: 2013-03-02; **修订日期:** 2013-04-15.

基金项目: 国家自然科学基金青年基金资助项目(No. 51205006); 清华大学摩擦学国家重点实验室开放基金资助项目(No. SKLTKF11A01); 北京市委组织部优秀人才计划资助项目(No. 2011D005003000006); 北京市委重点资助项目(No. KZ201210011012)

nm respectively. When the line width is more than 22 nm, the max stress and max deformation decrease with increase of Cu line width. The increasing frequency will not change the stress distribution and displacement. The results are in agreement with the defect found in industrial applications.

Key words: Post-chemical Mechanic Polishing(post-CMP); megasonic cleaning; Cu interconnect; Finite Element Method (FEM)

1 引 言

在超大规模集成电路的器件制造中,为降低金属互联线的延迟效应以提高芯片处理速度,目前采用具有较低电阻率和较高抗电迁移性能的金属 Cu 作为互联金属材料,并采用低介电常数(low- k)材料代替传统的 SiO_2 进行电隔离。然而铜的化学属性活泼,low- k 材料的机械强度远低于传统材料,加之特征尺寸的不断缩小(已降至 45 nm 以下^[1])对表面污染和缺陷的容忍度降低,目前,怎样在提高表面质量的同时避免缺陷发生已成为化学机械抛光以及其后清洗工艺中的难题。

20~800 kHz 频率的声波为超声波,800 kHz 以上频率的声波称为兆声波^[2]。兆声清洗是由超声波清洗发展而来的,是目前生产线上最有效的化学机械抛光后清洗工艺之一。兆声清洗采用兆声喷嘴喷射清洗液或者兆声清洗槽水浴进行湿法清洗^[3],将声波能量通过清洗液传递到物料表面。高频交变声压导致流体振动,空化气泡产生,微气泡振动,边界层减薄等诸多效应^[4-6]。在高速流体对表面不断冲击下,表面吸附的颗粒等污染物暴露后被提拉或滚动除去。尽管工业应用已证明兆声清洗对纳米颗粒去除率提高有明显作用,但随着线宽的减小,互联层数增多,结构复杂化,兆声清洗会对器件结构形成一定的破坏,特别是 low- k 材料机械强度较低,存在多孔结构,常见的缺陷包括 Cu 和 low- k 材料的剥离以及 low- k 材料分层等^[7-9]。因此,研究兆声清洗工艺中缺陷发生的根本原因,在不牺牲颗粒去除率的前提下避免缺陷产生,提高成品率,具有重要的实用意义。

有限元分析广泛应用于各种超光滑表面的抛光及后清洗机理的研究当中^[10-12]。本文利用有限元法对于铜/low- k 互联兆声清洗过程中互联结构内产生的应力应变进行分析,讨论不同的交变载荷以及互联结构特征尺寸的影响,进而对破

坏的条件、形式进行预测,分析及预测结果与工业实践中的缺陷形式一致。

2 模型及分析

有限元法对互联结构破坏预测的基本思路是:抽取典型的互联结构建立模型,将兆声波引发的流体振动以及空化气穴爆裂带来的流体冲击等效成不同的交变载荷或冲击载荷,考察模型在动态冲击载荷下的响应情况,分析应力及应变,与材料弹性极限及不同材料间的键合能进行比较,判断破坏条件。有限元分析采用商用软件 ABAQUS。采用不同的载荷函数和模型结构尺寸,对应不同的冲击载荷情况和线宽,分析其影响。

2.1 模型建立

实际的互联线为多层多线立体结构,常见线宽从 32 nm 到 65 nm 不等,下一代互联技术节点的线宽为 22 nm,互联层数为 7~12 层以致更多^[1]。集成电路晶圆的加工流程包括前端工艺(front end of line, FEOL)和后端工艺(back end of line, BEOL),以金属层加工开始为分界。前端工艺包括晶圆基底(Si)的制备、氧化(SiO_2)以及形成 p-n 结等工艺,后端工艺指互联层的加工。图 1 所示为典型的 Cu/low- k 互联层最底部的两层横截面示意图(彩图见期刊电子版),前端工艺形成的结构略去,从后端工艺开始,采用 Cu 及 low- k 材料加工互联层。Cu1 层表示互联结构的

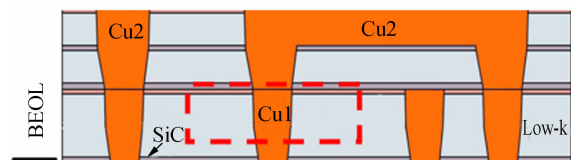


图 1 典型的 Cu/low- k 互联结构。红色虚线框内的部分为有限元分析的结构单元

Fig. 1 Typical Cu/low- k interconnect architecture. The region enclosed by a dashed (red) line is the cell analyzed by the FEM.

第一层, Cu2 层表示互联结构的第二层。Cu1 层进行化学机械抛光后利用兆声清洗工艺去除残余的抛光液及抛光颗粒污染。有限元模型选取重复结构中的一个典型单元, 如图 1 红色虚线线框中单元(彩图见期刊电子版)。单元两边界对应 low- k 材料内部。

2.2 网格、单元及边界条件

对于铜互联来说, 横截面内的线宽尺寸远远小于垂直于图示平面的互联线长度方向的尺寸, 因此有限元分析时采用二维平面应变单元, 即受力前后单元厚度不变, 与分析平面正交的应变为零。网格采用四节点的四边形单元, 如图 2。

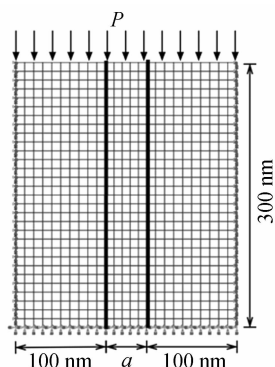


图 2 网格划分及边界条件示意图。顶部载荷为均布正压力; 底部节点限制垂直方向位移, 两侧节点限制水平方向位移。

Fig. 2 FEM models of cell microstructures under a uniform normal pressure. The nodes at side boundaries are constrained against horizontal displacement, while those at bottom boundary are constrained against vertical displacement.

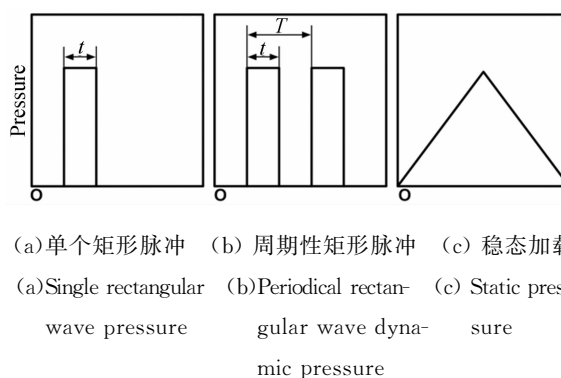
铜线宽为“ a ”, 取不同线宽(20~65 nm)进行比较。单侧 Low- k 材料宽度为 100 nm。根据集成电路铜互连加工的工业标准, 抛光进行平坦化之后的铜互连层深度为 300 nm, 称为 3 000 埃工艺(300 nm)。因此分析单元的高度为 300 nm。对于 25~65 nm 线宽采用均匀网格, 最小网格宽度约为 7 nm, 对于 25 nm 以下的线宽, 对于铜线内部进行网格细化, 最小网格宽度约为 5 nm。

由于仅对整个连续互联结构中的一个元胞单元进行分析, 在相应的边界处应设置对称或周期性边界条件。单元两侧为对称重复边界, 因此限制两侧边界节点的水平位移。由于底部与相对无限大的基底相连, 因此底部边界节点限制其垂直

方向位移。相应的网格与边界条件如图 2 所示。对于铜及 low- k 材料键合的边界, 在无破坏的情况下应变相同。

2.3 载荷和材料属性

在实际的兆声清洗工艺条件下, 兆声波频率不超过 5 MHz, 兆声波长最低可达 300 μm 。另一方面, 空化气泡的直径尺寸约为 1 μm ^[13]。可以看出, 无论是振动流体冲击波的波阵面还是气泡爆破的波阵面都远远大于互联线宽的特征尺寸, 因此, 加载在单一结构单元上的载荷可以简化为瞬时均布载荷(如图 3 所示)。



(a) 单个矩形脉冲 (b) 周期性矩形脉冲 (c) 稳态加载
(a) Single rectangular wave pressure (b) Periodical rectangular wave dynamic pressure (c) Static pressure

图 3 载荷函数

Fig. 3 Schematics of pressure loading functions

常用兆声换能器的功率为 300 W~1 kW, 可得兆声清洗功率密度最大值为 7~10 W/m^2 , 兆声场的振动声压最大值不到 1 MPa。假定气泡爆裂时空穴中心的压力约为 1 GPa^[12], 波阵面前端压力值应略低于空穴中心压力, 载荷近似为气泡爆裂冲击波波阵面前端压力, 取 600 MPa。由于气泡爆裂引发的流体冲击压力及流体速度接近兆声振动速度的上千倍, 本文主要讨论气泡爆裂对结构破坏的影响。在气泡爆破能量冲击下, 器件结构破坏机理可以分为冲击破坏和疲劳破坏, 或二者兼而有之。采用 3 种载荷函数对应不同的冲击情况。图 3(a) 为单个矩形脉冲函数, 对应单次气泡爆裂冲击载荷。图 3(b) 为周期性矩形脉冲函数, 对应多次气泡爆裂的循环载荷。图 3(c) 为稳态加载情况, 作为对比, 总加载时间为 2.2 μs 。工业常用的兆声波换能器振荡频率为 950 kHz~1 MHz, 最高达 3 MHz 甚至 5 MHz。中高频的超声波换能器的振荡频率为 200~500 kHz。为讨论不同频段的影响, 在动态分析中采用 3 种不

同的兆声频率 f ,代表最高超声频率,常用兆声频率和最高兆声频率,分别为 0.5, 1, 5 MHz,对应周期为 T ,脉冲宽度 t 为半个周期,分别为 $t_1 = 1 \times 10^{-6}$ s, $t_2 = 0.5 \times 10^{-6}$ s, $t_3 = 1 \times 10^{-7}$ s。时间步长随着结构和频率的改变自动选择,约为 7×10^{-11} s。

将铜薄膜和 low- k 材料均简化为各向同性材料,相应材料的密度、弹性模量以及泊松比参见表 1。其中 low- k 材料为多孔二氧化硅,孔隙率 18.04%,其物理属性参数取自司丽娜的论文^[14],为分子动力学模拟的结果。

表 1 材料力学属性参数^[14]
Tab. 1 Material mechanical properties

材料	密度 $\rho / (\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$	弹性模量 E / GPa	泊松比 γ
Cu	8.3	110	0.34
Low- k	1.8	44	0.18

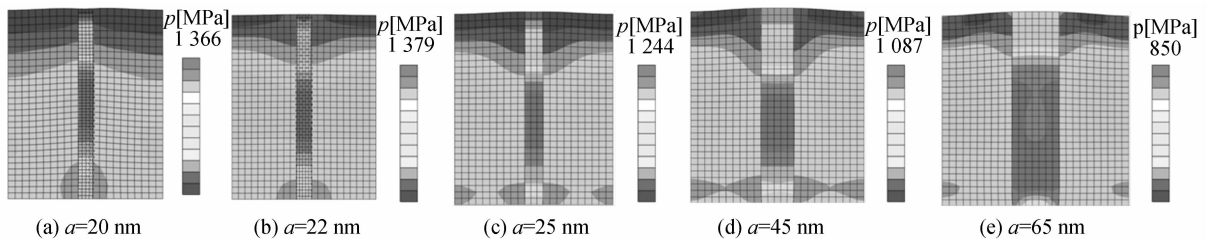


图 4 不同线宽下的应力云图(频率 5 MHz)

Fig. 4 Stress cloud charts of different line widths in frequency of 5 MHz

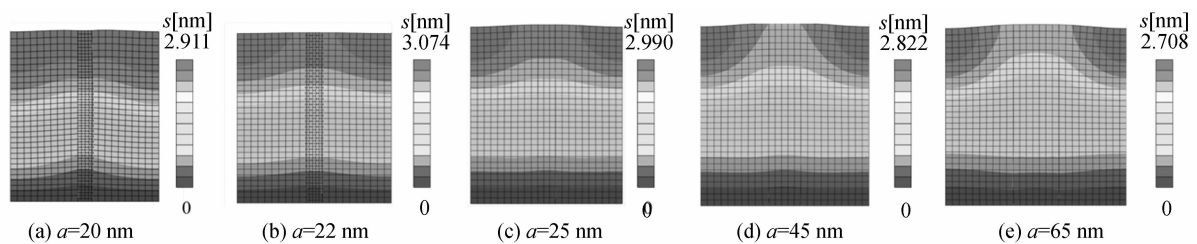


图 5 不同线宽下的应变云图(频率 5 MHz)

Fig. 5 Displacement cloud charts of different line widths in frequency of 5 MHz

3.2 位移分布

不同铜线宽度的结构单元在达到最大应力时的位移云图如图 5(a)~(e),频率为 5 MHz。单元底部应变接近于零,而顶部受变形影响中间凸起,最大应变发生在上表面两边界处,即 low- k 材料中心。最大质点位移 2.708~3.074 nm。由于两侧及底部边界条件限制,顶部加载,low- k 材

3 结果及讨论

3.1 应力分布

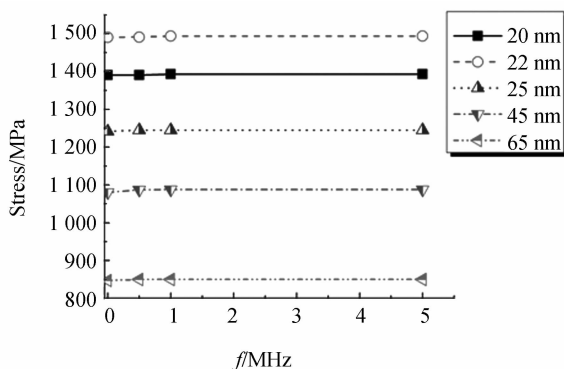
不同铜线宽度的结构单元在达到最大应力时的应力云图如图 4(a)~(e),频率为 5 MHz。最大应力在铜内部中间段出现,其值大于 850 MPa,超过纳米铜薄膜的屈服极限(约 350 MPa),因此,空穴爆裂引起的塑性变形及结构损伤不可避免。特别是铜与 low- k 材料键合区域结合能较弱,分子距离为 0.305 nm,键合能为 934 kJ/mol^[13],又存在较明显的应力集中,因此优先在界面结合处发生铜与 low- k 材料分离的破坏失效。实验证实这种不同材料分层广泛存在,还会在清洗液中化学品的腐蚀作用下加剧^[8]。在 low- k 材料中部存在较明显应力集中,是导致 low- k 材料分层破坏^[7]的主要原因。

料机械强度较铜低,这种应变分布从理论上是合理的。

3.3 Cu 线宽的影响

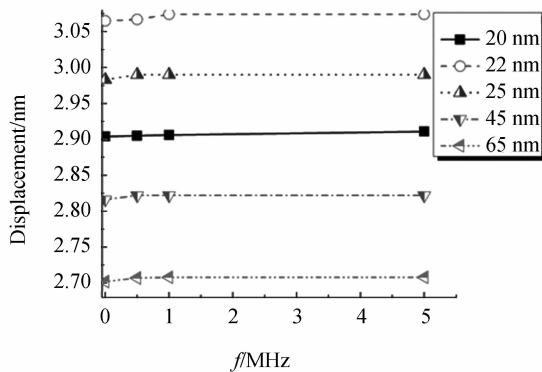
线宽变化对应力应变的分布及最大值都有明显影响。最大应力值随线宽变化如图 6(a)所示,与此对应的最大应变值变化如图 6(b)所示。当线宽只有 20 nm 时,铜及 low- k 材料的最大应力

发生在二者结合部位的中间深度,顶部应力分布呈“人”字形,在 low- k 材料中心偏底部位置也存在应力较大值;在结构顶部两种材料均有较大的应变产生。随着线宽增加,在 22 nm 情况下 low- k 材料内部的应力极大区域扩大并连在一起,最大应力为 1 379 MPa,铜线部分应变减小,low- k 材料应变增大,其最大值达到 3.074 nm,这主要由于铜体积分数增加,刚度强度增加,变形减小,两种材料弹性模量不同引起的内应力更显著。对于这两种情况,结构破坏主要发生在界面处,易发生两种材料的分离。



(a) 最大应力

(a) Maximum stress



(b) 最大应变

(b) Maximum displacement

图 6 声波频率和线宽对应力应变的影响

Fig. 6 Effect of frequency and line width on stress and displacement

而当铜线宽进一步增加,从 25 nm 到 65 nm, low- k 材料的应力极值发生位置逐渐脱离并远离界面结合处,向 low- k 材料内部转移。这是由于铜的体积分数继续增加,破坏向强度较低的材料转移,但由于整体结构的刚度增加,最大应力应变

极值逐渐减小。因此除界面分离外,低强度的 low- k 材料将发生内部损伤,也就是材料内部分层。当铜线宽达到 65 nm 时,如图 4(e) 中所示,铜内部出现应力较小值,应力最大值位置向底部转移,预示破坏将集中在铜/low- k 界面处以及互连线的根部。

3.4 兆声频率的影响

如图 6 所示,随着频率减小,最大应力和最大应变变化不明显,线宽仅为 20~25 nm 时,最大应力和最大应变略有降低,静力加载下也可以看到应力应变最大值的降低。频率变化对应力应变的分布影响也不明显。

从图 7 的最大应力点的应力-时间曲线中可以看出,所选 20 nm 结构单元的阻尼振荡时间约为 10^{-8} s,对于 5 MHz 的兆声来说,单次加载时间约为 10^{-7} s,二者相差一个数量级,表明在单次加载过程中,阻尼振荡已经结束,结构已经达到稳态。特别是随着铜线宽增加,阻尼振荡时间减小,整个结构可以在更短的时间内达到稳态。因此对于单次加载来说,频率改变对于其应力应变分布及极值的影响不大。然而在塑性变形发生的情况下,周期载荷会导致内应力及应变的积累,高频声源则加速疲劳破坏。

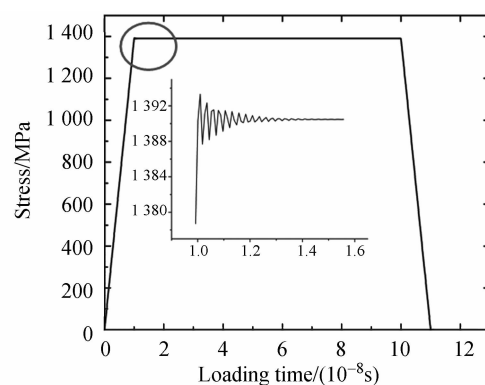


图 7 应力最大点的应力-时间曲线以及局部放大图。线宽 20 nm, 频率 5 MHz。

Fig. 7 Stress-time curve of the maximum stress point and its partial enlarged detail in frequency of 5 MHz and Cu line width of 20 nm

4 结 论

利用二维平面单元对铜互连兆声清洗当中的应力应变进行有限元分析,对破坏进行预测,与工

业上常见的清洗缺陷对照分析,有限元预测分析结果与实际破坏形式相符。空化气泡爆裂的冲击在铜内部中间段形成最大应力,其值为 850~1 379 MPa,会引起材料的塑性变形,形成界面分离和材料分层等结构破坏。这两种破坏形式已为工业实践所证实。铜线宽 22 nm, low- k 材料 100

nm 时得到最大应力及应变值分别为 1 379 MPa 和 3.074 nm。减小线宽时,铜的体积分数增加,更易发生结构破坏。由于结构阻尼振荡时间小于单次冲击载荷时间,兆声频率在 0.5~5 MHz 以内变化对单次冲击的应力应变分布及极值影响均不明显。

参考文献:

- [1] International Technology Roadmap for Semiconductors; Interconnect [R]. 2009ed., Semiconductor Industry Association, 2009.
- [2] 雷红. CMP 后清洗技术的研究进展[J]. 半导体技术, 2008, 5: 369-373.
LEI H. Advances in post-CMP cleaning technology [J]. *Semiconductor Technology*, 2008, 5: 369-373. (in Chinese)
- [3] BUSNAINA A A, KASHKOUSH I I, GALE G W. An experimental-study of megasonic cleaning of silicon-wafers [J]. *J Electrochem Soc.*, 1995, 142 (8): 2812-2817.
- [4] QI Q, BRERETON G. Mechanisms of removal of micron-sized particles by high-frequency ultrasonic waves [J]. *IEEE T Ultrason Ferr*, 1995, 42(4): 619-629.
- [5] KIM W, KIM TH, CHOI J. Mechanism of particle removal by megasonic waves [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2009, 94: 081908.
- [6] KAPILA V, DEYMIER P A, SHENDE H, *et al.*. Acoustic streaming effects in megasonic cleaning of EUV photomasks: A continuum model [J]. *SPIE*, 2005, 5992: 59923X-1-10.
- [7] REINHARDT K A, REIDY R F, DAVIOT J. *Low- k /Cu cleaning and drying*, in: *Handbook of Cleaning for Semiconductor Manufacturing-Fundamentals and Applications* [M]. Wiley, New York, 2011.
- [8] YAMADA Y, KONISHI N, NOGUCHI J, *et al.*. Influence of CMP slurries and post-CMP cleaning solutions on Cu interconnects and TDDB reliability [J]. *J. Electrochem. Soc.*, 2008, 155(7): H485-H490.
- [9] MINSIER V, PROOST J. Shock wave emission upon spherical bubble collapse during cavitation-induced megasonic surface cleaning [J]. *Ultrasonic Sonochemistry*, 2008, 15: 598-604.
- [10] 方慧, 郭培基, 余景池. 液体喷射抛光技术材料去除机理的有限元分析[J]. 光学精密工程, 2006, 13(2).
FANG H, GUO P J, YU J C. Analysis of material removal mechanism in fluid jet polishing by finite element method [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2006, 13(2). (in Chinese)
- [11] 王续跃, 许卫星, 徐文骥, 等. 硅片激光弯曲成形的数值模拟与实验[J]. 光学精密工程, 2008, 16(4): 605-610.
WANG X Y, XU W X, XU W J, *et al.*. Simulation and experiment of laser bending of silicon shee [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2008, 16(4): 605-610. (in Chinese)
- [12] 吴东江, 许媛, 王续跃, 等. 激光清洗硅片表面 Al_2O_3 颗粒的试验和理论分析[J]. 光学精密工程, 2006, 14(5): 764-770.
WU D J, XU Y, WANG X Y, *et al.*. Experimental and theoretical study on laser cleaning Al_2O_3 particle on silicon wafer surface [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2006, 14(5): 764-770. (in Chinese)
- [13] BENJAMIN T B, ELLIS A T. The collapse of cavitation bubbles and the pressures thereby produced against solid boundaries [C]. *Phil. Trans. R. Soc. London, Series A, Math. Phys. Sci.*, 1966: 221-240.
- [14] 司丽娜. 集成电路平坦化过程机械作用机理仿真研究[D]. 北京: 清华大学, 2011.
SI L N. *Mechanical effect mechanism during planarization technique in ULSI process studied by molecular dynamics simulation* [D]. Beijing: Tsinghua University, 2011. (in Chinese)

作者简介:



黄雅婷(1982—),女,辽宁锦州人,博士,讲师,2005年于清华大学获得学士学位,2010年于清华大学获得博士学位,主要从事化学机械抛光、摩擦学方面的研究。E-mail: huangyat@gmail.com



董秀萍(1973—),女,河南洛阳人,副教授,1996年于河南科技大学获得学士学位,2002年于北京理工大学获得硕士学位,2008年于北京科技大学获得博士学位,主要从事先进金属材料性能研究。E-mail: dongxp@th. btbu. edu. cn



孟春玲(1966—),女,山东昌乐人,教授,1989年于天津大学获学士学位,1996年于北京航空航天大学获硕士学位,主要从事固体力学、计算力学、有限元仿真分析等方面的研究。E-mail: mengcl@th. btbu. edu. cn



路新春(1966—),男,山东青岛人,研究员,博士生导师,1988年于吉林大学获学士学位,1991年于吉林大学获硕士学位,1994年于中国科学院金属研究所获博士学位,主要从事纳米结构材料的微观力学性能及摩擦磨损、化学机械抛光方面的研究。E-mail: xclu@tsinghua. edu. cn

(版权所有 未经许可 不得转载)

国际前沿光学成像技术与应用学术研讨会征文通知

10月20-22日 苏州

中国宇航学会光电技术专业委员会联合其他相关单位将于10月20-22日在苏州市举办“国际前沿光学成像技术与应用学术研讨会”。会议组委会将邀请国内外该领域的知名专家和学者到会共同交流,深入探讨前沿光学成像技术领域所取得的最新研究成果。

诚挚欢迎国内外相关领域科研院所的科研人员以及大专院校的教师、研究生等踊跃投稿。会议组委会届时将推荐会议论文至国家公开出版的优秀期刊(EI收录)发表。

<http://www.cnoenet.com/2013foi/>(更多详情,请浏览会议网站)

截稿日期:2013年9月10日

主办单位:美国光学学会(OSA)欧洲光学学会(EOS)中国宇航学会

承办单位:中国宇航学会光电技术专业委员会

支持媒体:

《红外与激光工程》(EI收录)

《光学 精密工程》(EI收录)

《强激光与粒子束》(EI收录)

中国宇航光电资讯网

征文方向:

○光学系统中的新技术

☆偏振成像技术

☆滤波技术

☆其他

○新型探测器技术

☆高灵敏度的探测器技术

☆高动态范围的探测器技术

☆新谱段探测器技术

☆其他

○新型成像体制

组委会联系方式:

会议联系:邓伟(022-58168510)

E-mail:conf@cnoenet.com

☆计算成像技术(计算光学成像,3D光学成像,鬼成像,全息成像,结构光照明,数值超分辨率技术)

☆显微成像技术(先进的显微技术,高分辨率荧光成像,物理超分辨率技术)

☆光谱成像技术

☆合成孔径成像技术

☆THZ成像技术

○前沿成像技术在国防、国土安全、遥感、测绘等领域应用