

半導体デバイスの微細化に対応した 応力シミュレーション技術

Stress Simulation Technology for Shrinkage of Semiconductor Devices

伊藤 祥代 鈴木 啓之

■ ITO Sachiyo

■ SUZUKI Keiji

半導体デバイスの微細化に伴い、機械的強度の低下に起因する不良が顕在化してきている。なかでも微細パターンが内部応力により座屈する不良は、半導体デバイスを微細化するうえで大きな課題となっている。信頼性の高い微細パターン加工プロセスを構築するためには、デバイス構造の応力挙動を把握し、不良の発生を予測する技術の開発が求められる。

東芝は、この要求に応えるため、有限要素法を用いた線形座屈解析により、微細パターンにおける座屈変形の発生を予測する技術を開発した。デバイス開発の初期段階で座屈変形の危険性が高いプロセスを抽出し、不良低減のための指針を提示することにより、開発コスト低減と歩留り向上に貢献できる。

Shrinkage of the design rules of semiconductor devices leads to defects in the manufacturing process resulting from decreased mechanical strength. In particular, buckling failure of fine pattern structures due to internal stress has become a serious issue in the further shrinkage of semiconductor devices. This type of failure is caused by highly compressive residual stress in the material. In order to realize a high-reliability process for fine structures, technologies to analyze the stress phenomena inside structures and to estimate the occurrence of failures are essential.

As a solution to this issue, Toshiba has developed a stress simulation technology to predict buckling failures using linear buckling analysis based on the finite element method. This technology is contributing to the reduction of development costs and improvements in yield and quality by making it possible to identify critical processes causing buckling failures and propose countermeasures against defects early in the development phase.

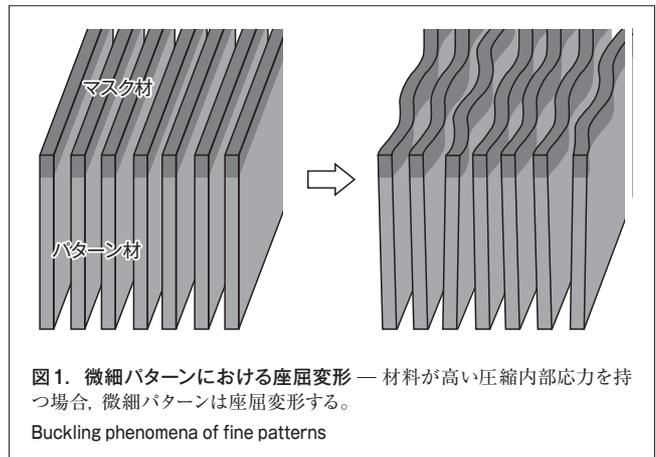
1 まえがき

近年、半導体デバイスの製造プロセスにおいて、大容量化と低コスト化を目的としてパターンの微細化と高集積化が進行しており、パターン幅が20 nm以下の微細パターン形成のための技術開発が進められている。微細化に伴ってパターンのアスペクト比が高くなり、わずかな外力によってパターンが曲げられる、あるいは倒れるといった機械的強度の低下に起因する不良が顕在化してきている。微細パターンがみずからの圧縮内部応力により座屈変形を起こす不良は、半導体デバイスの微細化を実現するうえで大きな課題となっている⁽¹⁾。

そこで東芝は、有限要素法を用いた線形座屈解析により、半導体デバイス製造プロセスにおける微細パターンでの座屈変形の発生を定量的に予測する技術を開発した。この解析結果をもとに、デバイス開発の初期段階で座屈危険プロセスを抽出し、座屈不良低減に向けた指針を提示することにより、開発コスト低減と歩留り向上に貢献できる。ここでは、線形座屈解析法の概要と、それを用いた座屈耐性の評価結果について述べる。

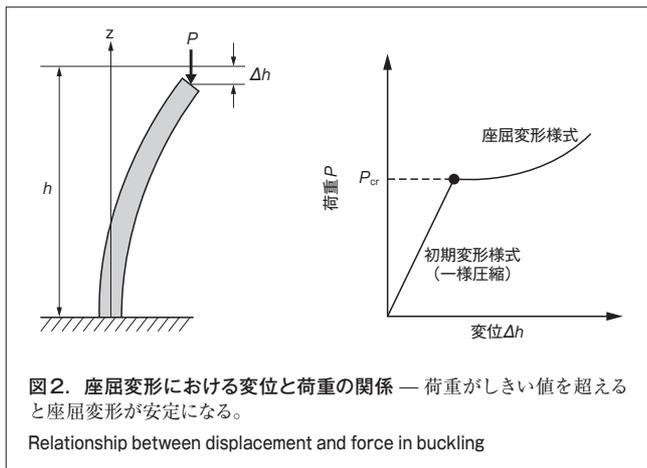
2 微細パターンにおける座屈変形の発生メカニズム

微細パターンにおける座屈変形の概要を図1に示す。微細



パターンとなる薄膜材料の上層にエッチング加工時のマスクとなる材料を積層し、リソグラフィ及びドライエッチング加工を行うことにより微細パターンが形成される。基板上に成膜された薄膜材料には、基板との線膨張係数差による熱応力や成膜時のひずみなどによる内部応力が発生する。パターン材あるいはマスク材が比較的大きな圧縮応力を持つ場合、その内部応力により微細パターンが座屈変形する。座屈変形を起こしたパターンには、波状の周期的なうねりが発生するという特徴がある。

座屈変形の例として、片持ち柱に軸圧縮荷重を印加した場



合の座屈変形の概要、及び変位と荷重の関係を図2に示す。構造物に圧縮方向の荷重 P が働く場合、しきい値以下では一様圧縮変形が起こるが、荷重がしきい値を超えた場合には横たわみ変形が一様圧縮変形よりも安定した状態となる。この現象が座屈であり、座屈が発生するしきい値を座屈荷重 P_{cr} と呼ぶ。この柱の P_{cr} は式(1)で表わされる。

$$P_{cr} = \pi^2 EI / 4h^2 \quad (1)$$

ここで、 E は材料のヤング率、 I は断面2次モーメント、 h は柱の長さである。座屈荷重は細長い形状の構造物ほど小さくなることから、半導体デバイスではパターンの微細化に伴う高アスペクト比化が座屈耐性低下の原因となっている。

3 線形座屈解析

有限要素法を用いた線形座屈解析は、座屈が起こる臨界荷重である P_{cr} と、構造物が座屈時に示す座屈モード形状を導出する解析手法である。図2に示した一様圧縮変形と横たわみ変形の分岐点における平衡方程式は式(2)で表わされる。

$$([K] - \lambda[S]) \{u\} = 0 \quad (2)$$

$[K]$: 構造剛性マトリックス
(曲がり変形によるひずみエネルギー増分)

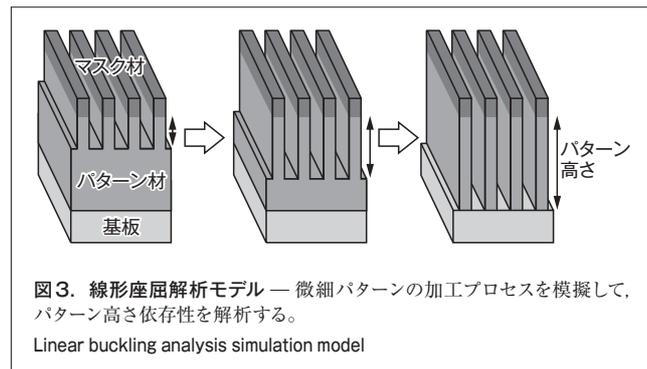
$[S]$: 初期応力マトリックス
(初期荷重 P による仕事増分)

$\{u\}$: 固有ベクトル (たわみの変位ベクトル)

λ : 固有値 (座屈荷重係数)

線形座屈解析は数学的には固有値問題を構成し、 $\{u\} \neq 0$ のもとで式(2)が成り立つ最小固有値 λ を求めることに帰着する。 λ は座屈荷重係数と呼ばれ、 P_{cr} と構造物に働く P の倍率を表す。

$$P_{cr} = \lambda \times P \quad (3)$$



線形座屈解析は理想化された線形弾性構造物の座屈強度を予測するものであり、 λ は座屈の起こりやすさの指標として用いられる。理論的には $\lambda = 1$ が座屈発生のしきい値であり、 $0 < \lambda \leq 1$ の場合に座屈が発生すると予測される。 λ が1より大きいほど座屈に対する耐性が高く、また $\lambda \leq 0$ の場合は初期荷重が引張り荷重であることを表し、この場合には座屈は発生しないと判断する。微細パターンの形状と材料物性値を入力して線形座屈解析を行い、 λ を導出することにより、所望の微細パターン構造における座屈不良の発生を予測することができる。

線形座屈解析の一例を図3に示す。微細パターンの加工プロセスを模擬し、パターン材とマスク材の積層構造においてパターン高さ (加工深さ) に対する λ の変化を解析した。要素には3次元ソリッド要素を用い、長手方向を鏡面境界条件とした。解析に使用したパターン材とマスク材のヤング率、ポアソン比、及び室温における内部応力を表1に示す。内部応力の正の値は引張り応力を、負の値は圧縮応力を表す。

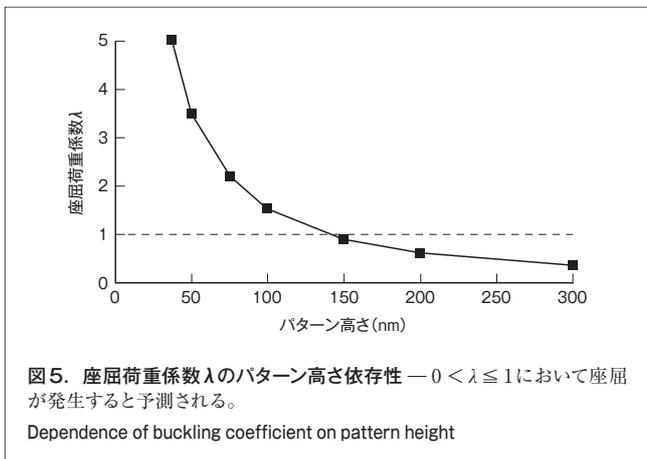
表1. 解析に用いた材料物性値
Mechanical properties of materials used in analysis

| 項目 | ヤング率 (GPa) | ポアソン比 | 内部応力 (MPa) |
|-------|------------|-------|------------|
| マスク材 | 130 | 0.28 | -1,000 |
| パターン材 | 15 | 0.3 | -20 |

線形座屈解析の結果を図4と図5に示す。

図4は、座屈時に予想される座屈モード形状である。微細パターンの座屈不良に特徴的な波状の周期的なうねりが再現されている。

図5は、解析結果から導出した λ のパターン高さ依存性である。パターン高さの増加に伴い λ は減少している。 $0 < \lambda \leq 1$ が座屈発生の条件であることから、この解析例では、パターン高さ150 nm以上で座屈が発生する危険性が高いと予測される。



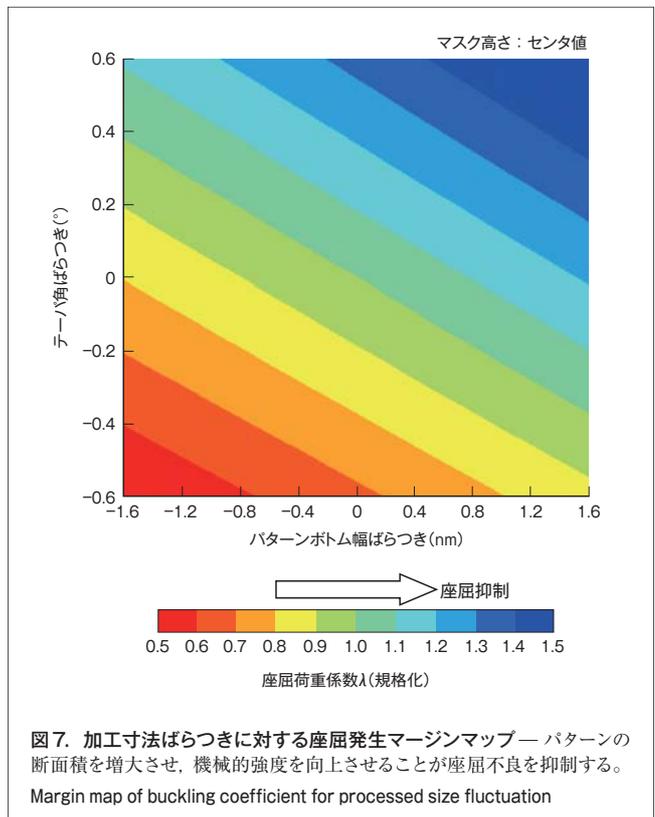
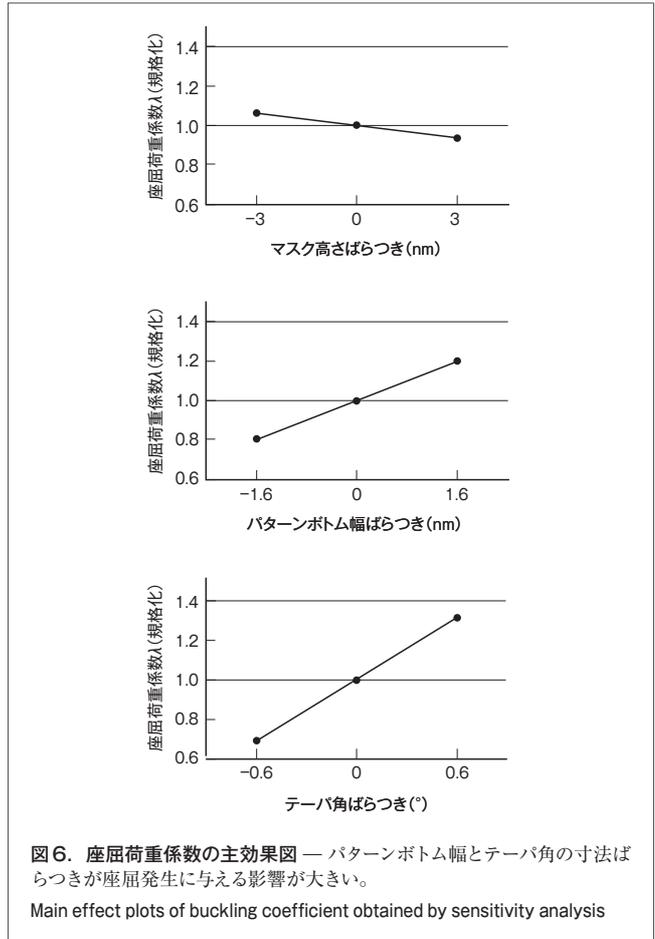
4 加工寸法ばらつきが座屈発生に与える影響

微細パターン加工時に発生する寸法ばらつきが座屈変形の発生に与える影響を把握することは、製造プロセスのマージンを確保し歩留りを向上させるうえで非常に重要である。パターンボトム幅、マスク高さ、及びテーパ角などの形状パラメータに対するλの影響度解析を行うことにより、寸法ばらつきに対するマージンを検証する。

寸法ばらつきに対する影響度解析の条件を表2に、解析の結果得られた主効果を図6に示す。各形状パラメータのセン

表2. 寸法ばらつきに対する影響度解析条件
Conditions of sensitivity analysis for processed size fluctuation

| 形状パラメータ | 水準 |
|----------|--------------|
| マスク高さ | センタ値 ±3 nm |
| パターンボトム幅 | センタ値 ±1.6 nm |
| テーパ角 | センタ値 ±0.6° |



タ値における λ を1として規格化した。図から、パターンボトム幅とテーパ角が小さいほど、またマスク高さが高いほど λ は低下し、特にパターンボトム幅とテーパ角の影響が大きいことがわかる。影響度解析結果をもとに応答曲面方程式を導出し、パターンボトム幅とテーパ角のばらつきに対する λ のマップ(図7)を作成した。パターン断面積を増大させ機械的強度を向上させることが、座屈不良の抑制に向けたマージン確保に有効である。

5 材料物性値が座屈発生に与える影響

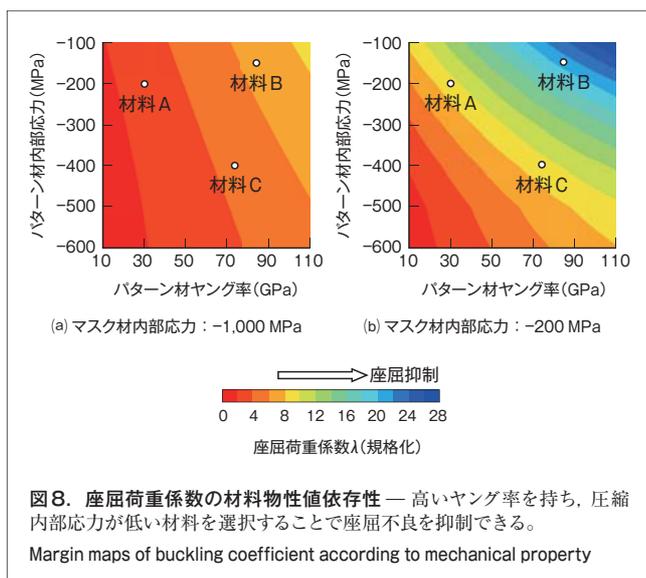
前述のように、構造物の座屈は圧縮荷重による変形が発生要因である。そのため微細パターンの座屈変形を抑制するためには、材料が持つ圧縮内部応力を低減することが有効である。また、高いヤング率を持つ材料をパターン材に使用し、荷重を受けた際に変形しにくくすることも座屈不良の抑制に有効と考えられる。材料のヤング率や内部応力値といった材料物性値を適切に選択して信頼性の高いプロセスを構築する技術は、今後更に微細化が進む半導体デバイス開発にとって重要である。

パターン材の材料物性値が座屈発生に与える影響を解析した。表3に示した条件について線形座屈解析を実施し、 λ を

表3. 材料物性値に対する影響度解析条件

Conditions of sensitivity analysis for mechanical properties

| 項目 | 水準 | | |
|-----------------|--------|------|------|
| | 1 | 2 | 3 |
| マスク材内部応力 (MPa) | -1,000 | -600 | -200 |
| パターン材内部応力 (MPa) | -600 | -350 | -100 |
| パターン材ヤング率 (GPa) | 10 | 60 | 110 |



導出した。影響度解析から作成した λ の材料物性値依存性を図8に示す。

3種類の材料(A, B, C)のヤング率と内部応力を図8中にプロットした。高いヤング率を持つパターン材料、及び座屈の発生要因である圧縮内部応力が小さいマスク材料とパターン材料を選択することが、座屈不良の抑制につながる。このように、線形座屈解析を用いて座屈発生の危険度予測を行うことにより、半導体デバイス開発の初期段階で座屈変形の危険性が高い材料とプロセスを抽出し、それらの改善に向けた指針を提示することができる。

6 あとがき

有限要素法を用いた線形座屈解析により、微細パターンにおける座屈変形の発生を予測する技術を開発した。新規デバイス開発の初期段階で座屈変形の危険性が高いプロセスを抽出し、不良低減のための指針を提示することにより、開発コスト低減と歩留り向上に貢献できる。

次世代半導体デバイスでは、微細化に伴って製造プロセスやデバイス構造がよりいっそう複雑になってきている。応力シミュレーションを用いてデバイス構造の応力挙動を定量的に把握し、不良の発生を予測する技術を開発することは、今後ますます重要になると考えられる。

文献

- (1) Darnon, M. et al. Undulation of sub-100 nm porous dielectric structures: A mechanical analysis. Appl. Phys. Lett. **91**, 19, 2007, p.194103-1-194103-3.



伊藤 祥代 ITO Sachiyo

生産技術センター プロセス研究センター研究主務。
電子デバイスのシミュレーション技術開発に従事。応用物理学会会員。
Process Research Center



鈴木 啓之 SUZUKI Keiji

生産技術センター プロセス研究センター主任研究員。
電子デバイスのシミュレーション技術開発に従事。応用物理学会会員。
Process Research Center