

반도체용 박막재료의 열응력-변형 특성에 미치는 passivation 층의 영향 분석

최호성, *이광렬, 권동일
 서울대학교 공과대학 재료공학부
 *한국과학기술연구원 세라믹스연구부

Effects of passivation layer on the thermal deformation behavior of metal film used in semiconductor devices

Ho-Seong Choi, *Kwang Ryol Lee and Dongil Kwon
 School of Materials Science and Engineering, Seoul National University, Seoul, 151-742
 *Division of Ceramic, Korea Institute of Science and Technology, Seoul.

Abstract - Metal thin films such as aluminum have been used as interconnects in semiconductor device. Recently, these materials are applied to structural materials in microsensors and microactuators. In this study, we evaluate deformation and strength behavior of aluminum alloy film. Three layer model for thermal deformation of multilayered thin film material is introduced and applied to Si/Al(1%Si)/SiO₂ system. Based on beam bending theory and concept of bending strain, elastic and elastic/plastic thermal deformation behaviors of multilayered materials can be estimated. In the case of plastic deformation of ductile layer, strain rate equations based on deformation mechanism map are employed for describe the stress relaxation effect. To experimentally examine deformation of multilayered thin film materials, in-situ laser scanning method is used to measure curvature of specimens during heating and cooling. The thickness of SiO₂ layer is varied to estimate third-layer effect of thermal deformation of metal films, and its effect on deformation behavior are discussed.

1. 서 론

반도체에서 전기적인 신호를 전달하는 배선으로 사용되는 금속박막의 기계적, 구조적인 신뢰성과 수명에 있어서 제조 및 작동시에 발생하는 열간류용력은 매우 중요한 영향을 미친다. 금속박막과 이를 이용한 박막 배선의 소성변형 기구들은 박막배선에 void, hillock 등의 미세결함을 발생시키거나 passivation 층에 균열을 발생시켜 파손에 이르게 하여 소자의 신뢰성 및 수명을 결정하는 중요한 인자이다. 또한 고집적화와 다기능성의 요구에 의하여 다층박막의 응용이 보편화되고 있으며, 이러한 재료내의 응력 및 변형특성에 대한 관심이 높아지고 있다. 일반적으로 박막의 응력을 평가하는 방법중에 하나로서 laser scanning 법이 있다. 이 방법은 각 층간의 변형차이에 의한 굽힘(bending)을 이용하여 응력을 얻어내는 방법으로서 일반적으로 Stoney 식[1] 또는 이를 적절하게 수정한 식[2-3]을 이용한다. 이 Stoney 식은 박막의 평균적인 응력만을 나타내므로 소성변형 등의 파손부위를 예측하기에 어려우며 다층박막의 경우에는 평균응력만을 제시하므로 한계를 지닌다. 따라서 이러한 다층박막의 응력에 대한 해석에 대한 접근이 여러 연구자들에 의하여 이루어졌다.[4-6] 그러나 이러한 대부분의 연구들은 박막의 평균응력만을 고려하고 있으므로 실제상황과 차이를 지니며, 기판이 매우 두

꺼운 경우를 가정하였으므로 적층된 막의 두께가 두꺼워짐에 따라 실제값과 오차를 지닐 수 밖에 없으며, 탄성범위내에서 전개된 모델이 대부분이므로 금속재료에 발생하는 소성변형을 고려할 수 없다. 이러한 단점을 극복하기 위한 응력 해석모델을 제시하여 이로부터 다층화되는 박막의 열변형거동을 예측하였으며, 이를 Si 기판위에 증착된 Al(1%Si) 박막에 대해서 적용하여 passivation 층으로 널리 쓰이는 SiO₂를 증착하였을 경우에 응력인가양상과 열사이클 시의 열적변형양상의 변화를 평가 분석하였다.

2. 본 론

2.1. 이론적 분석

먼저 박막재료에 작용하는 열응력과 이로 인한 변형을 해석하기 위하여 평면응력상태에 있는 박막재료를 생각하였다. 그림 1에서와 같이 각각 E₁, E₂, E₃의 탄성계수와 α₁, α₂, α₃의 열팽창계수, ν₁, ν₂, ν₃의 포아송비를 가지는 서로 다른 재료를 각각 h₁, h₂, h₃의 두께로 적층시킨 3층 재료에 대해서, 열응력성분만 고려하기 위하여 초기에는 응력성분이 없는 것으로, 두 번째 층은 금속재료로서 탄성변형 후에 완전소성변형을 일으킨다고 가정하였다.

위에서 정의한 3층 구조에 대해서, 열응력에 의한 변형은 각 층에서의 굽힘에 의한 변형이 표면에서부터 선형적이므로 이를 다음과 같이 표현될 수 있다.

$$\epsilon = \epsilon_0 + xz \tag{1}$$

여기에서 ε₀는 z=0에서의 변형률, x는 기판의 곡률이다.

재료들이 탄성변형을 하는 경우에 대해서 i번째 층에 작용하는 평면응력상태에서의 열응력 성분은 다음과 같이 나타내어 질 수 있다.

$$\sigma_i = E_i^0(\epsilon - \alpha_i \Delta T) \tag{2}$$

여기에서 E_i⁰는 이축응력상태에서의 탄성계수이다.

빔 이론에 의해서, 다층박막재료는 구조물의 전체 힘과 모멘트가 외부에서 행해지는 힘과 모멘트와 일치하는 방향으로 변형이 이루어진다. 이 때의 평형식은 다음과 같이 나타내어진다.

$$\int_0^{h_1} \sigma_1 dz + \int_{h_1}^{h_1+h_2} \sigma_2 dz + \int_{h_1+h_2}^{h_1+h_2+h_3} \sigma_3 dz = 0 \tag{3}$$

$$\int_0^{h_1} \sigma_1 z dz + \int_{h_1}^{h_1+h_2} \sigma_2 z dz + \int_{h_1+h_2}^{h_1+h_2+h_3} \sigma_3 z dz = 0 \tag{4}$$

여기에 식 (2)를 대입하여 정리하면 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$x = \frac{C_5 C_1 - C_3 C_2}{C_4 C_1 - C_2^2} \Delta T \tag{5}$$

여기에서 C₁에서 C₅ 까지의 상수들은 각 층을 이루고

있는 재료들의 열적, 기계적 물성들과 기하학적 함수인 층두께로 이루어져 있으며, 이를 다음과 같이 정리할 수 있다.

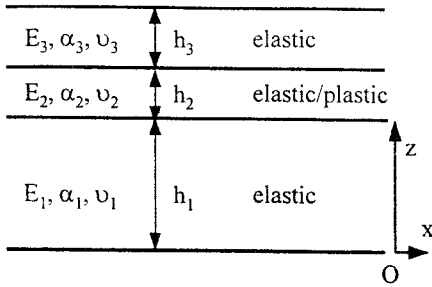


Fig. 1. Multilayered thin film material.

$$C_1 = \sum_{i=1}^3 E_i^0 h_i \quad (6)$$

$$C_2 = \sum_{i=1}^3 E_i^0 \frac{\xi_i^2 - \xi_{i-1}^2}{2} \quad (7)$$

$$C_3 = \sum_{i=1}^3 E_i^0 \alpha_i h_i \quad (8)$$

$$C_4 = \sum_{i=1}^3 E_i^0 \frac{\xi_i^3 - \xi_{i-1}^3}{3} \quad (9)$$

$$C_5 = \sum_{i=1}^3 E_i^0 \alpha_i \frac{\xi_i^2 - \xi_{i-1}^2}{2} \quad (10)$$

$$\xi_i = \sum_{j=1}^i h_j, \quad \xi_0 = 0 \quad (11)$$

온도의 차이가 증가하면 박막재료내에 작용하는 열응력도 증가하게 된다. 이 경우에 기판에 인장응력이 작용하는 상황이 되어 두 번째 금속박막층에서 세 번째 층과의 계면에서의 응력이 재료의 항복응력이상이 된다면 이 재료에 소성변형이 일어난다. 이 경우에는 전위의 슬립이나 크리프 등의 소성변형기구에 의하여 변형이 일어나게 된다. 응력이 증가함에 따라 재료의 소성변형이 계면에서부터 박막의 두께방향으로 전이되며, 응력이 점점 더 크게 작용하여 두 번째 층에서 전체적인 소성변형을 일으키는 경우에는 식 (2)에서의 경우와 유사하나 두 번째 층의 응력을 재료의 항복응력으로 대입하여 나타낼 수 있다. 이를 힘과 모멘트의 평형관계에 대입하면 다층박막재료의 탄소성 변형 모델을 다음과 같이 제시할 수 있다.

$$x = \frac{C_7 C_8 - C_6 C_{11}}{C_6 C_{10} - C_7^2} \Delta T + \frac{C_7 C_9 - C_6 C_{12}}{C_6 C_{10} - C_7^2} \sigma_{y2} \quad (12)$$

여기에서 C_6 에서부터 C_{12} 까지의 상수들은 앞에서와 마찬가지로 적층된 재료들의 열적, 기계적 특성들과 기하학적 구조의 함수로 나타낼 수 있다.

$$C_6 = E_1^0 h_1 + E_3^0 h_3 \quad (13)$$

$$C_7 = E_1^0 \frac{h_1^2}{2} + E_2^0 \frac{(h_1 + h_2 + h_3)^2 - (h_1 + h_2)^2}{2} \quad (14)$$

$$C_8 = E_1^0 \alpha_1 h_1 + E_3^0 \alpha_3 h_3 \quad (15)$$

$$C_9 = -\sigma_{y2} h_2 \quad (16)$$

$$C_{10} = E_1^0 \frac{h_1^3}{3} + E_3^0 \frac{(h_1 + h_2 + h_3)^3 - (h_1 + h_2)^3}{3} \quad (17)$$

$$C_{11} = E_1^0 \alpha_1 \frac{h_1^2}{2} + E_3^0 \alpha_3 \frac{(h_1 + h_2 + h_3)^2 - (h_1 + h_2)^2}{2} \quad (18)$$

$$C_{12} = -\sigma_{y2} \frac{(h_1 + h_2)^2 - h_1^2}{2} \quad (19)$$

한편, 박막재료에 작용하는 응력은 탄성계수와 열팽창

계수와 곱에 주된 인자로서 기여한다. 일반적으로 탄성계수는 온도에 따라 감소하며, 열팽창계수는 온도에 따라 증가한다.[7, 8] 본 연구에서는 각각의 층에서 사용된 재료의 탄성계수, 포아송비, 열팽창계수등의 온도의존성을 고려하였다. 특히 온도상승에 따라 금속박막의 항복응력은 온도에 따라 급격하게 감소하는 경향을 보인다. 여기에서는 P.A. Flinn(9)이 제안한 온도의존성 모델을 바탕으로 하여 Al의 항복강도가 온도에 따라 선형적으로 감소한다고 가정하였다.[10]

2.2. 실험방법

열변형특성 평가를 위한 박막을 증착하기 위한 기판으로서 $550\mu\text{m}$ 의 두께를 가지는 (100)방향의 실리콘 웨이퍼를 thermal oxidation을 행하여 800\AA 의 SiO_2 를 형성시켰다. 이 SiO_2 는 Al 층과 Si 기판과의 원자간 상호확산을 방지하며 증착시에 발생할 수 있는 금속박막의 epitaxial growth를 억제하는 역할을 한다. 그 후에 DC 마그네트론 스퍼터링을 이용하여 반도체용 배선으로 사용되는 Al(1%Si) 박막을 $1.0\mu\text{m}$ 증착하였다. 이때의 초기진공은 8×10^{-8} torr에서 Ar 가스의 유입량을 35sccm으로 조절하여 working pressure를 6×10^{-3} torr를 유지하였으며, 1.8kw의 power를 가하였다. Al(1%Si) 박막 위에 PECVD 방법을 이용하여 300°C 의 기판온도에서 SiO_2 막을 각각 0.5, $1.0\mu\text{m}$ 를 증착하였다. 박막재료의 열변형 특성의 평가를 위한 열사이클 실험은 온도의 변화와 동시에 시편의 실시간(in-situ) 레이저 곡률측정이 가능한 Tencor FLX model(KLA Tencor Co.)을 이용하였다. 이 장치의 측정원리가 그림 2에 나와 있다. 시편의 형상은 평면응력상태의 $2.9\text{cm} \times 2.9\text{cm}$ 의 정사각형 모양으로 하였으며 대각선 방향으로 스캐닝을 행하여 곡률을 측정하였다. 열사이클은 시편을 상온에서부터 $10^\circ\text{C}/\text{min}$ 의 균일한 온도로 40°C 까지 승온시켰으며, 최고온도에 도달한 후에는 상온까지 냉각시켰다. 초기의 냉각속도는 승온속도와 같은 $10^\circ\text{C}/\text{min}$ 이었으나, 150°C 아래에서는 장비의 cooling capability의 한계로 인하여 $1^\circ\text{C}/\text{min}$ 의 속도로 냉각되었다. 시편의 곡률은 매 10°C 의 온도변화마다 측정되었다.

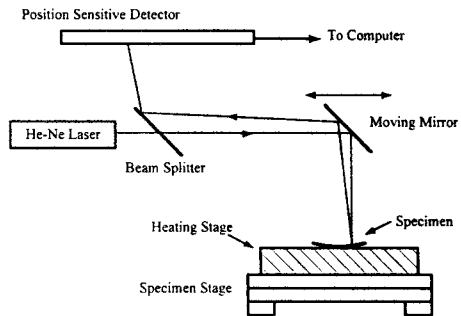


Fig.2. Schematic of laser scanning set-up.

2.3. 실험결과 및 고찰

그림 3(a)는 Si 기판위에 Al(1%Si) 박막을 $1.0\mu\text{m}$ 증착한 시편을 400°C 까지 열사이클한 결과이다. 증착후 금속박막에는 대략 50MPa 정도의 인장잔류응력이 있게 되는데, 이는 일반적인 스퍼터링시의 잔류응력값과 거의 일치한다. Al(1%Si)의 열팽창계수가 기판인 Si 보다 훨씬 크기 때문에 상온에서부터 온도가 증가함에 따라 박막의 열팽창이 구속되면서 압축응력성분이 증가하면서 곡률이 감소하게 된다. 항복이 일어나기 전까지는 탄성적인 변형에 의존하므로 온도의 증가에 따라 선형적인 변화를 보인다. 이는 앞에서 제시된 모델에서 예측하는 변형의 기울기와 잘 일치한다. 대략 150°C 정도에

서 이르게 되면 박막에 작용하는 응력이 항복강도에 도달하게 되며 이 때부터 금속박막에 전위의 활주가 일어나면서 곡선이 선형에서 벗어나기 시작한다. 약 200°C 이상의 온도에서부터는 Al(1%Si)박막의 결정이 조대화되기 시작하여 균일한 크기로 분포될 때까지 성장하며 그 크기는 박막두께의 범위이다. 소성변형에는 앞에서 언급한 전위의 활주뿐 아니라 입내나 입계, 표면에서의 원자의 확산에 의한 크리프 등의 고온소성변형기구들이 작용한다. 이들 소성변형기구들은 온도에 지수적인 의존성을 가지므로 Al의 $T/T_m=0.7$ 정도인 300°C 이후부터 전체 소성변형의 주된 기구로서 작용한다. 최고온도에 도달하고 난 후에는 냉각초기에는 탄성적인 회복이 일어나며 고온에서의 항복응력에 도달하면 항복이 일어나면서 상온에 냉각될 때까지 금속박막의 유동응력에 따라 곡선의 개형이 결정된다. 두 번째 사이클 이전 열사이클시와는 달리 열사이클 전후의 곡률의 차이가 없는데, 전단계의 열사이클을 거치면서 증착초기의 잔류응력이 소거되었으며, 고온으로 가면서 결정립균일화 등으로 미세조직이 균일화되기 때문이다. 이후로 열사이클을 반복하여도 곡선은 거의 변함이 없다.

그림 3(b)는 Al(1%Si) 박막위에 SiO₂ 0.5 μ m 증착된 박막재료의 열사이클 실험의 결과이다. 이 경우에는 그림 3(a)와 형태가 매우 큰 차이를 나타낸다. 우선 passivation 층의 영향으로 인하여 곡률의 변화가 완만하게 이루어짐을 알 수 있으며, 항복이 시작하여 초기 선형부에서 벗어나면서 이후의 변형이 그림 3(a)에서와는 달리 완만한 전이를 나타낸다. 또한 항복현상 이후에 곡률의 감소가 거의 없이 고온에서도 변형에 대한 저항성을 잃지 않았다. 이는 passivation 층이 계면에서의 전위의 이동을 억제하고, 크리프에 의한 변형기구를 구속함으로써 인하여 금속박막의 유동응력을 증가시킨 것이다. 최고온도에 도달한 이후에 냉각과정에서는 이들의 차이가 명확하게 드러나는데, 금속만 증착한 경우에는 냉각초기에서부터 인장응력시의 항복이 일어나서 상온까지 이르게 되어 냉각초기에 탄성회복이 거의 발생하지 않은 것을 알 수 있다. 그러나, passivation을 입힌 경우에는 대략 300°C까지 탄성회복이 진행된 후에 항복이 일어나면서 상온에 이르게 됨을 알 수 있다. 냉각시의 탄성회복의 양은 열사이클시의 유동응력과 큰 관련이 있는데, 변형시 사용된 에너지에 대해서 비가역적인 변형인 소성변형으로 소비된 양이 적은 경우에는 역방향의 변형시에 탄성변형의 양이 증가한다. Passivation 층이 증착된 경우에는 앞에서 언급한 바와 같이 소성변형 기구들이 구속되어 그만큼 소성변형의 양이 감소하였으므로 그만큼 탄성회복의 양이 증가하는 것이다.

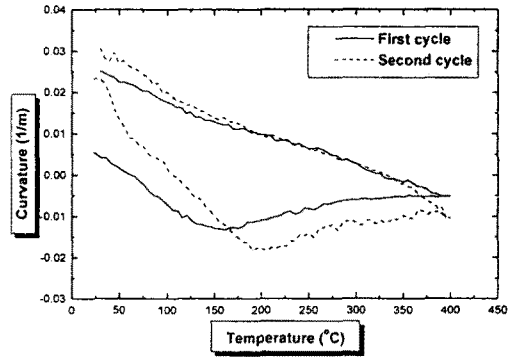
또한 Al(1%Si) 박막위에 증착된 SiO₂ 층의 morphology는 Al(1%Si)박막의 표면형상(roughness)을 따라 결정되는데, 이러한 표면거칠기가 박막의 결정립성장을 억제하므로 충분히 결정립 조대화에 의한 포화(saturation)에 이르지 못하게 한다. SiO₂를 1.0 μ m 증착한 경우에도 변형양상은 두께차이를 고려하면 유사했다.

3. 결 론

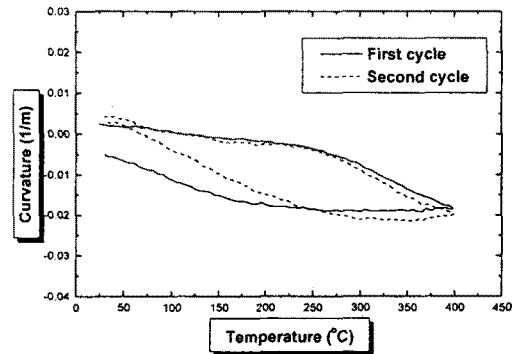
1. 다층박막재료의 열변형에 대한 탄소성 모델을 범이론에 기반하여 제시하였으며, 이를 통하여 다층박막재료의 제조공정 및 사용시에 발생하는 열응력과 이로 인한 재료의 변형 특성을 예측하고 하였으며, 이론식에 대한 검증용 위하여 Si/Al(1%Si)와 Si/Al(1%Si)/SiO₂ 박막에 대한 열사이클실험을 하였다.

2. Si/Al(1%Si)/SiO₂에 대하여, 온도가 상승함에 따라 탄성변형시의 곡률의 변화가 passivation 층이 없을 경우보다 감소하였으며, 소성변형으로의 전이도 완만하게 이루어졌다. 또한 고온에서의 소성변형에 대한 저항성도 증가하였으며 이는 제시한 변형모델을 통하여 언급된 결과와 비교적 잘 일치하였다.

3. 최고온도에 도달한 이후의 냉각에서 Si/Al(1%Si)와 Si/Al(1%Si)/SiO₂는 변형특성에서 큰 차이를 나타내었다. SiO₂ 층을 증착함에 따라 고온에서의 유동응력이 증가하였으며, 300°C까지 탄성회복이 진행된 후에 소성변형으로 진행되었다. 이는 자유표면의 소멸에 의한 고온에서의 변형의 구속으로 인하여 소성변형이 억제되었기 때문이다.



(a)



(b)

Fig. 3. Variation of curvature as a function of temperature: (a) Si/Al(1%Si) system, (b) Si/Al(1%Si)/SiO₂ 0.5 μ m system.

[참 고 문 헌]

1. G.G. Stoney, *Proc. Roy. Soc. London*, A82 (1909) 172.
2. C.B. Masters, N.J. Salamon and D.E. Fahnlinec, *Thin Film Stress and Mechanical Properties II (Mater. Res. Soc. Proc., 188, Pittsburgh, PA) (1990) 21.*
3. B.D. Harper and C.P. Wu, *Int. J. Solids Struct.*, 26 (1990) 511.
4. P.H. Townsend, D.M. Barnett and T.A. Brunner, *J. Appl. Phys.*, 62 (1987) 4438.
5. E. Suhir, *J. Appl. Mech.*, 55 (1988) 143.
6. S. Suresh, A.E. Giannakopoulos and M. Olsson, *J. Mech. Phys. Solids*, 42 (1994) 979.
7. *Thermophysical Properties of Matter*, edited by Y.S. Touloukian (IFI/Plenum, New York, Washington, 1977).
8. *American Institute of Physics Handbook*, edited by D.E. Gray et al., (McGraw-Hill, New York, 1957).
9. P.A. Flinn, D.S. Gardner and W.D. Nix, *IEEE Trans. Elec. Dev.*, ED34 (1987) 689.
10. R.E. Jones, Jr., *Proc. 25th Rel. Phys. Symp.*, (IEEE, San Diego, 1987) 9.