
BACHELORARBEIT

Christian Klewer

**Charakterisierung von mechanischen
Spannungen und Defekten an
„Through-Silicon-Via“-Strukturen**

Mittweida, 2011

BACHELORARBEIT

Christian Klewer

**Characterization of Mechanical
Stress and Defects near
“Through-Silicon-Via”-Structures**

Mittweida, 2011

BACHELORARBEIT

Charakterisierung von mechanischen Spannungen und Defekten an „Through-Silicon-Via“-Strukturen

Autor:

Christian Klewer

Studiengang:

Informationstechnik/Mikroelektronik

Seminargruppe:

IT07wM-B

Erstprüfer:

Prof. Dr.-Ing. Gerd Dost

Zweitprüfer:

Dr. habil. Michael Hecker

Einreichung:

Mittweida, 22.09.2011

Verteidigung/Bewertung:

Mittweida, 2011

BACHELOR THESIS

Characterization of Mechanical Stress and Defects near “Through-Silicon-Via”-Structures

author:

Christian Klewer

course of studies:

Informationstechnik/Mikroelektronik

seminar group:

IT07wM-B

first examiner:

Prof. Dr.-Ing. Gerd Dost

second examiner:

Dr. habil. Michael Hecker

submission:

Mittweida, 22.09.2011

defence/ evaluation:

Mittweida, 2011

Bibliografische Beschreibung:

Klewer, Christian:

Charakterisierung von mechanischen Spannungen und Defekten an „Through-Silicon-Via“-Strukturen – 2011 – 22,60 Seiten.

09648 Mittweida, Hochschule Mittweida (FH), University of Applied Sciences, Fakultät Elektro- und Informationstechnik, Bachelorarbeit, 2011.

Referat:

Einer der nächsten technologischen Schritte in der Fertigung von modernen Schaltkreisen ist neben der Strukturverkleinerung der Zusammenschluss von mehreren einzelnen Elementen, wie zum Beispiel CPU, GPU und Speicher, durch Stapeln von einzelnen Chips in vertikaler Richtung. Für ein platzsparendes Verdrahtungssystem innerhalb des Stapels wird derzeit an der Entwicklung neuer Kontaktierungsverfahren gearbeitet. Through Silicon Vertical Interconnect Access (TSV)-Strukturen sollen in den zukünftigen Technologiegenerationen die Verbindung von einzelnen Chips realisieren und die 3D-Integration ermöglichen.

Diese wissenschaftliche Arbeit befasst sich mit ersten oberflächennahen Spannungsuntersuchungen an TSV-Teststrukturen mittels μ -Raman-Spektroskopie. Es werden verschiedene Ursachen der Spannungen identifiziert. Zusätzlich wird die Beeinflussung des Spannungszustandes durch eine Wärmebehandlung bei Temperaturen von $\leq 380^\circ\text{C}$ untersucht. Des Weiteren wird die Tiefenabhängigkeit der Spannungen diskutiert und eine Methode zur Erkennung von oberflächennahen Defekten und Delaminierungseffekten an TSVs entwickelt.

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|------|
| Inhaltsverzeichnis | I |
| Abbildungsverzeichnis | III |
| Tabellenverzeichnis | IV |
| Abkürzungsverzeichnis..... | V |
| Nomenklatur | VIII |
| 1. Einleitung | 1 |
| 1.1 Motivation | 1 |
| 1.2 Ziele und Gliederung der Arbeit | 5 |
| 2. Theoretische Grundlagen..... | 7 |
| 2.1 Methoden der Spannungsuntersuchung in Festkörpern..... | 7 |
| 2.2 Raman-Spektroskopie | 8 |
| 2.2.1 Prinzip des Raman-Streuprozesses | 8 |
| 2.2.2 Raman-Tensor und Auswahlregeln | 10 |
| 2.2.3 Zusammenhang zwischen Phononen und Dehnung..... | 11 |
| 2.2.4 Modellannahmen zum Spannungstensor | 14 |
| 2.2.4 Räumliche Auflösung | 21 |
| 2.2.5 Tiefenauflösung | 23 |
| 3. Experimentelle Grundlagen | 25 |
| 3.1 Probenaufbau..... | 25 |
| 3.2 Raman-Spektroskop | 27 |
| 3.3 4-Punkt-Biege-Tester..... | 29 |
| 4. Spannungsuntersuchungen an TSV-Strukturen..... | 31 |
| 4.1 Allgemeines..... | 31 |
| 4.1.1 Messungen | 31 |
| 4.4.2 Auswertung..... | 32 |
| 4.2 Oberflächennahe Untersuchungen..... | 33 |
| Ausgangsmessung..... | 33 |
| 4.2.1 Einfluss dielektrischer Schichten | 35 |
| 4.2.2 Einfluss der Kupferabscheidung | 38 |
| 4.2.3 Einfluss einer Temperung | 41 |

| | | |
|-------|---|-----|
| 4.3 | Tiefenabhängigkeit der Spannungen..... | 44 |
| 4.3.1 | TSV-Querschnittsuntersuchung | 44 |
| 4.3.2 | Variation der Laser-Eindringtiefe..... | 50 |
| 4.4 | Mechanische Untersuchungen | 53 |
| 4.4.1 | In situ 4-Punkt-Biege-Test und μ -Raman Spektroskopie | 53 |
| 4.4.2 | Oberflächennahe Defekterkennung..... | 56 |
| 5. | Zusammenfassung und Ausblick | 59 |
| | Danksagung | XI |
| | Eigenständigkeitserklärung | XIV |
| | Literaturverzeichnis | XVI |

Abbildungsverzeichnis

| | |
|---|----|
| Abbildung 1-1 2-Chip-Interposertechnologie mit Drahtbond-Anbindung | 2 |
| Abbildung 1-2 3D-Integration mit TSVs als vertikale Verbindungselemente | 3 |
| Abbildung 1-3: Defektbildung durch Kupferprotrusion..... | 4 |
| Abbildung 2-1 Intensitätsverlauf für die Bestimmung des Laserprofils. | 21 |
| Abbildung 3-1 Übersicht des TSV-Layoutes und TSV- Querschnittsaufnahme..... | 25 |
| Abbildung 3-2 Prozessablauf der TSV-Proben-Herstellung | 26 |
| Abbildung 3-3 SEM-Querschnittsbild eines voll prozessierten TSV | 27 |
| Abbildung 3-4 Versuchsplatz μ -Raman-Spektroskop..... | 27 |
| Abbildung 3-5 Strahlengang des μ -Raman-Spektroskops | 28 |
| Abbildung 3-6 Schematischer Aufbau des 4-Punkt-Biege-Testers..... | 29 |
| Abbildung 3-7 Zustände der 4-Punkt-Biege-Methode | 29 |
| Abbildung 4-1 μ -Raman-Map an Cu-Pads..... | 32 |
| Abbildung 4-2 Übersicht top-down Messung | 33 |
| Abbildung 4-3 Vergleich der Spannungsprofile der Probenserien A und G..... | 34 |
| Abbildung 4-4 Einfluss von SiO_x auf den Spannungszustand..... | 36 |
| Abbildung 4-5 Einfluss der SiN_x -Schichtdicke auf den Spannungszustand..... | 36 |
| Abbildung 4-6 2D-Spannungsverlauf an einem einzelnen ungefüllten TSV | 37 |
| Abbildung 4-7 Einfluss der Kupferabscheidung auf das Spannungsverhalten | 39 |
| Abbildung 4-8 Spannungen im Si vor und nach CMP der dielektrischen Schichten | 39 |
| Abbildung 4-9 Oberflächennaher Schichtaufbau vor und nach CMP | 40 |
| Abbildung 4-10 Einfluss einer Temperung auf den Spannungszustand 1 | 42 |
| Abbildung 4-11 Einfluss einer Temperung auf den Spannungszustand 2..... | 42 |
| Abbildung 4-12 AFM-Aufnahme von 3 TSVs nach Temperung (380°C) | 43 |
| Abbildung 4-13 Vergleich der TSV-Struktur vor und nach der Temperung | 44 |
| Abbildung 4-14 Darstellung Messungen auf einer Querschnittspräparation..... | 45 |
| Abbildung 4-15 Vergleich zwischen cross-section- und top-down-Messungen | 46 |
| Abbildung 4-16 TSV-Querschnittsmap des oberflächennahen Bereiches..... | 47 |
| Abbildung 4-17 TSV im Querschnitt - Erklärung Nitridspannung..... | 47 |
| Abbildung 4-18 Geometrievergleich top-down und cross-section | 48 |
| Abbildung 4-19 Spannungsprofil im mittleren Querschnittsbereich | 49 |
| Abbildung 4-20 Übersicht der Spannungen im unteren TSV-Querschnittsbereich | 49 |
| Abbildung 4-21 Schematischer Kupferspannungsverlauf | 51 |
| Abbildung 4-22 Tiefenabhängigkeit der Nitridspannungen..... | 52 |
| Abbildung 4-23 Tiefenabhängigkeit der Kupferspannungen | 52 |
| Abbildung 4-24 Einfluss mechanischer Spannungen auf TSV-Proben | 54 |
| Abbildung 4-25 Kristallstruktur um TSV bei mechanischer Verspannung | 55 |
| Abbildung 4-26 SEM-Aufnahmen von Nanoindentationen..... | 56 |
| Abbildung 4-27 Einfluss mechanischer Spannungen auf TSVs mit Defekten | 58 |

Tabellenverzeichnis

| | |
|---|----|
| Tabelle 2-1 Ausgewählte Methoden der Spannungsmessung in Festkörpern [15]..... | 7 |
| Tabelle 2-2 Raman-Auswahlregeln für (001) und (110) Oberflächen | 11 |
| Tabelle 2-3 Laserspot-Profilbreite unterschiedlicher Laserwellenlängen..... | 22 |
| Tabelle 2-4 Eindringtiefe des Lichtes in Silizium | 23 |
| Tabelle 4-1 Verwendete Parameter für die experimentellen Untersuchungen | 31 |
| Tabelle 4-2 Probenübersicht für die Untersuchung des Temperatureinflusses | 41 |

Abkürzungsverzeichnis

A - H

| | |
|-------------|---|
| AFM | <u>A</u>tomic <u>F</u>orce <u>M</u>icroscopy <i>(Rasterkraftmikroskop)</i> |
| AMD | <u>A</u>dvanced <u>M</u>icro <u>D</u>evelopments Inc. <i>(US-amerikanischer Chiphersteller)</i> |
| AR | <u>A</u>spect <u>R</u>atio <i>(Aspektverhältnis)</i> |
| BEoL | <u>B</u>ack <u>E</u>nd of <u>L</u>ine <i>(Prozessschritte für die Metallisierungsebenen)</i> |
| CBED | <u>C</u>onvergent <u>B</u>eam <u>E</u>lectron <u>D</u>iffraction <i>(konvergente Elektronenbeugung)</i> |
| CCD | <u>C</u>harge <u>C</u>oupled <u>D</u>evice <i>(lichtempfindliches elektronisches Bauelement)</i> |
| CMP | <u>C</u>hemical <u>M</u>echanical <u>P</u>olish <i>(chemisch-mechanisches Polieren)</i> |
| CPU | <u>C</u>entral <u>P</u>rocessing <u>U</u>nit <i>(Hauptprozessor)</i> |
| DRIE | <u>D</u>eep <u>R</u>eactive <u>I</u>on <u>E</u>tching <i>(Reaktives Ionentiefenätzen)</i> |
| FEM | <u>F</u>inite <u>E</u>lemente <u>M</u>ethode |
| FIB | <u>F</u>ocused <u>I</u>on <u>B</u>eam <i>(fokussierter Ionenstrahl)</i> |
| FEoL | <u>F</u>ront <u>E</u>nd of <u>L</u>ine <i>(Prozessschritte für die aktiven Gebiete)</i> |
| FWHM | <u>F</u>ull <u>W</u>idth at <u>H</u>alf <u>M</u>aximum <i>(Halbwertsbreite)</i> |
| GPU | <u>G</u>raphics <u>P</u>rocessing <u>U</u>nit <i>(Grafikprozessor)</i> |

H – S

| | |
|------------------------|---|
| HKMG | <u>H</u>igh-<u>k</u> <u>M</u>etal <u>G</u>ate (Gate-Dielektrikum des Transistors besteht aus einem Material mit einer hohen dielektrischen Konstante und das Gate besteht aus einem Metall) |
| HRXRD | <u>H</u>igh <u>R</u>esolution <u>X</u>-<u>R</u>ay <u>D</u>iffraction (hochauflösende Röntgenbeugung) |
| IC | <u>I</u>ntegrated <u>C</u>ircuit (integrierter Schaltkreis) |
| LiMi | <u>L</u>icht<u>m</u>ikroskop |
| LO | <u>L</u>ongitudinale <u>O</u>ptische <u>P</u>honenen |
| NA | <u>N</u>umerische <u>A</u>pertur (beschreibt das Vermögen eines optischen Elements, Licht zu fokussieren) |
| MM | <u>M</u>ore <u>M</u>oore (Trend der Strukturverkleinerung in der Halbleiterindustrie) |
| MoL | <u>M</u>iddle <u>o</u>f <u>L</u>ine (Zusammenfassung der Halbleiter-Prozessschritte für die Kontaktierungsebene zwischen FEoL und BEoL) |
| MtM | <u>M</u>ore <u>t</u>han <u>M</u>oore (Trend der Integration komplexer Systeme auf einem Chip) |
| PC | <u>P</u>ersonal <u>C</u>omputer |
| PDP | <u>P</u>honenen-<u>D</u>eformations-<u>P</u>otentiale (Materialparameter) |
| PoP | <u>P</u>ackage <u>o</u>n <u>P</u>ackage (IC-Verpackungstechnologie) |
| SEM | <u>S</u>canning <u>E</u>lectron <u>M</u>icroscope (Rasterelektronenmikroskop) |
| SiO_x | Siliziumoxid (Chemische Verbindung von Silizium und Sauerstoff; der Index "x" beschreibt das Mengenverhältnis beider Elemente) |
| SiN_x | Siliziumnitrid (Chemische Verbindung von Silizium und Stickstoff; der Index "x" beschreibt das Mengenverhältnis beider Elemente) |
| SiP | <u>S</u>ystem <u>i</u>n <u>P</u>ackage (IC-Verpackungstechnologie) |

S – Z

| | |
|-------------|---|
| SOI | <u>S</u>ilicon <u>O</u>n <u>I</u>nsulator („Silizium auf einem Isolator“) |
| SoP | <u>S</u>ystem <u>o</u>n <u>P</u>ackage (IC-Verpackungstechnologie) |
| TERS | <u>T</u>ip <u>E</u>nhanced <u>R</u>aman <u>S</u>pectroscopy (Kombination von μ -Raman-Spektroskopie und AFM um die Ortsauflösung der Messung zu verbessern) |
| TSV | <u>T</u>rough <u>S</u>ilicon <u>V</u>ia (vertikale elektrische Verbindung durch den gesamten Waferquerschnitt) |
| TO | <u>T</u>ransversale <u>O</u>ptische Phononen |
| VIA | <u>V</u>ertical <u>I</u>nterconnect <u>A</u>ccess (Kontaktverbindung zwischen zwei Metallisierungsebenen) |
| VASE | <u>V</u>ariable <u>A</u>ngle <u>S</u>pectroscopic <u>E</u>llipsometry (optisches Messverfahren mit variablem Einstrahlwinkel zur Analyse dielektrischer Materialeigenschaften dünner Filme) |
| XRD | <u>X</u>-<u>R</u>ay <u>D</u>iffraction (Röntgenbeugung) |

Nomenklatur

| | |
|--|---|
| C | Konstante für die Raman-Intensität |
| C_{ijkl} | Elastizitätstensor |
| D | Raman-Streuprofil |
| d_p | Eindringtiefe |
| E | elektrisches Feld |
| e_i | Polarisationsrichtung einfallendes Licht |
| e_j | Polarisationsrichtung gestreutes Licht |
| I | Raman-Intensität |
| I_d | Intensität des Lichtes, welches nicht zur Oberfläche zurückgestreut wird |
| I_s | Intensität des Lichtes, welches aus dem Bereich zwischen der Tiefe d und der Oberfläche zurückgestreut wird |
| I₀ | eingestrahlte Lichtintensität |
| K_{αβ} | Kraftkonstanten-Tensor |
| K^ˆ_{αβ} | gedrehter Kraftkonstanten-Tensor |
| p, q, r | PDPs (kartesisches Koordinatensystem) |
| p^ˆ, q^ˆ, r^ˆ | PDPs (Probenkoordinatensystem) |
| R_j | Ramantensor |
| R^ˆ_j | gedrehter Ramantensor |
| S | Sensitivitätsfaktor |
| S_{ijkl} | elastische Koeffizienten im kartesischen Koordinatensystem |
| S^ˆ_{ijkl} | elastische Koeffizienten im Probenkoordinatensystem |
| w | Fokusbreite |
| x^ˆ, y^ˆ, z^ˆ | Koordinatenachsen des Probensystems |

| | |
|----------------------------|---|
| α | Polarisierbarkeit |
| α' | Absorptionskoeffizient |
| α_k | Veränderung der Polarisierbarkeit |
| $\delta_{\alpha\beta}$ | Kronecker Delta-Symbol |
| $\Delta\omega$ | Raman-Frequenzänderung durch Spannung im Silizium |
| Δx | kleinster mit Licht aufzulösender Abstand zweier Strukturen |
| ϵ_{kl} | Dehnungstensor |
| ϵ'_{kl} | gedrehter Dehnungstensor |
| η_α, η_β | kartesische Koordinaten der Eigenvektoren |
| λ | Wellenlänge |
| λ_j | Eigenwert |
| μ' | induziertes Dipolmoment |
| ν_{stokes} | Frequenz der gestreuten Stokes-Strahlung |
| $\nu_{\text{Anti-Stokes}}$ | Frequenz der gestreuten Anti-Stokes-Strahlung |
| σ_Δ | Spannungsoffset |
| σ_{ij} | Spannungstensor |
| ω | Frequenz der Raman-Mode |
| $\omega_{s,j}$ | Raman-Frequenz im verspannten Silizium |
| $\omega_{0,j}$ | Raman-Frequenz im unverspannten Silizium |

1. Einleitung

1.1 Motivation

Die Halbleiterindustrie gehört zu den innovativsten und am schnellsten wachsenden Industrien der Welt. Kurz nachdem eine neue Technologie auf dem Markt erhältlich ist, wird sie durch Entwicklungen der neuesten Generation in Hinsicht auf Performance, Zuverlässigkeit oder Funktion abgelöst. So beschrieb Gordon Moore 1965 die rasch fortschreitende Entwicklung mit folgender Aussage:

[...]The complexity for minimum component costs has increased at a rate of roughly a factor of two per year.[...] Over the longer term, the rate of increase is a bit more uncertain, although there is no reason to believe it will not remain nearly constant for at least 10 years.[...] [1].

Später revidierte er seine Aussage auf eine Verdoppelung alle zwei Jahre. Beschleunigt durch die wachsende Nachfrage nach Elektronikprodukten, vor allem im privaten Sektor aber auch in der Industrie, stieg die Komplexität und somit die Zahl der integrierten Transistoren eines Schaltkreises über die vergangenen Jahrzehnte stetig an. Derzeit werden in der aktuellen AMD-Prozessorgeneration „Llano“, welche in 32nm-Technologie auf SOI¹ Basis und mit HKMG² bei GLOBALFOUNDRIES in Dresden gefertigt wird, rund 1 Milliarde Transistoren³ [2] integriert. Die Strukturverkleinerung stellte über Jahrzehnte ein geeignetes Mittel dar, um die Komplexität der Schaltkreise zu erweitern. Die weltweite Volumenproduktion führender Halbleiterfirmen erfolgt derzeit mit Strukturbreiten zwischen 130 und 32nm, jedoch wird parallel dazu an den neuen Technologiegenerationen 28/20/14nm geforscht. Bei einer Strukturbreite von 32nm ist die Gate-Kanal-Isolierung nur noch wenige Nanometer dick und es treten vermehrt Prob-

¹ SOI – „Silicon on Insulator“ Schaltkreise werden in eine Silizium-Schicht, welche auf einem Isolator abgeschieden ist, integriert. Es ergeben sich dadurch kürzere Schaltzeiten und geringere Leckströme.

² HKMG – “High k + Metal Gate” Ein Material (z.B. HfO_2 $\epsilon_r=25$ [44]), welches eine hohe relative Permittivität besitzt und das metallische Gate eines Transistors von seinem Kanal isoliert und somit Leckströme reduziert.

³ Im Vergleich hat der 15 Jahre alte K5-Prozessor von AMD nur rund 4,3 Mio. Transistoren und wurde auf 350nm Basis von 1996-1997 gefertigt [45].

leme wie kritische Leck- oder Tunnelströme auf [3]. Durch den Einsatz von z.B. HKMG soll diesen Effekten entgegengewirkt werden. Allerdings kommt bereits heute die reine Strukturverkleinerung an ihre physikalischen Grenzen und ist nicht mehr das einzige Mittel für die Erhöhung der Komplexität. Dies spiegelt sich auch in einem neuen Trend, welcher unter dem Namen „More-than-Moore“ (MtM) bekannt ist, wider. MtM entwickelt sich unabhängig vom „More Moore“ (MM)-Trend und beschreibt die steigende Funktionalität integrierter Systeme. Es werden zukünftig verschiedene Funktionen wie „analog/mixed signal“-Verarbeitung, mikromechanische Systeme, Sensoren und Aktuatoren oder mikrofluidische Systeme auf einem Chip integriert [4].

Doch wie verbindet man diese Teilsysteme in einem kompakten System?

Neben dem bekannten SiP-Konzept¹ stellt die Interposer-Technologie einen ersten Schritt der Implementierung mehrerer einzeln integrierter Funktionalitäten in einem Gehäuse dar. Hierbei werden ein oder mehrere Chip(s) auf ein Substrat aufgesetzt und über einen „Interposer“ elektrisch miteinander verbunden (Abbildung 1-1). Nachteile sind der große Flächenverbrauch, die begrenzte Anzahl an elektrischen Verbindungen bei Bonddrahtkontaktierung und die parasitären elektrischen Eigenschaften der Kontaktierung².

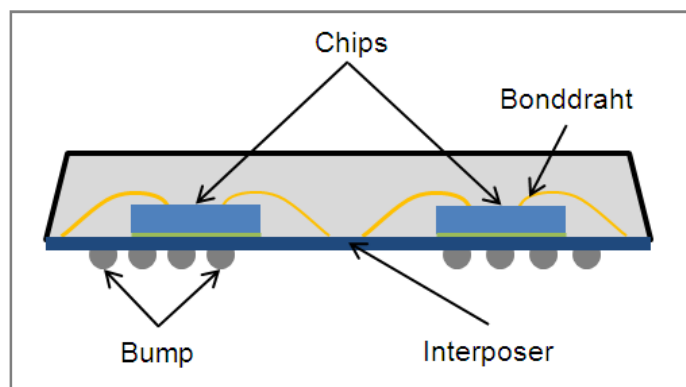


Abbildung 1-1 2-Chip-Interposertechnologie mit Drahtbond-Anbindung

¹ SiP - System in Package

² z.B. Kontaktwiderstand zwischen Bondpad und Bonddraht; RC-Verhalten des Bonddrahtes

Der nächste logische Schritt ist eine vertikale Stapelung von Chips¹ auf einem Träger-substrat. Hierbei existieren bereits verschiedene Ansätze wie „Package on Package“² (PoP) oder „System on Package“³ (SoP). Jedoch sind diese Verfahren, bei denen bis zu acht Chips gestapelt werden können, durch den Flächenverbrauch der Wirebonds in der Anzahl der elektrischen Verbindungen limitiert. Des Weiteren kommt es zu thermischen Problemen aufgrund der hohen Packungsdichte der Dies⁴ und Einschränkungen in der elektrischen Performance durch parasitäre Effekte an den Kontaktierungsstellen [5].

Der Einsatz von „Through Silicon Vertical Interconnect Access“ (TSV) bietet eine Alternative zu den genannten Verfahren und ermöglicht eine 3D-Integration über viele Ebenen. Die TSVs dienen dabei als Kontaktierungselemente zwischen Vorder- und Rückseite eines Chips (Abbildung 1-2). Die einzelnen Ebenen werden dann mit sogenannten „micro bumps“ elektrisch verbunden.

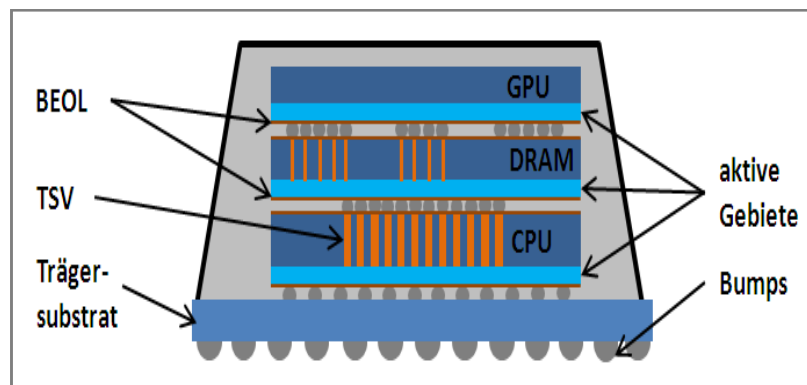


Abbildung 1-2 3D-Integration mit TSVs als vertikale Verbindungselemente

Zurzeit existieren verschiedene Konzepte für die Herstellung und die Materialien der TSVs. Kupfer stellt ein mögliches Material für die Realisierung der Strukturen dar. Diese werden in den nächsten Jahren einen Durchmesser zwischen 100µm und 1µm und ein Aspektverhältnis von bis zu 20:1 [6] haben. Der Unterschied im thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Kupfer und Silizium⁵ kann zu Spannungen im umliegenden Silizium führen. Spannungen können z.B. zur Bildung und Wanderung von Gitterstö-

¹ Auch als 3D-Integration bekannt.

² PoP ist eine 3D-Packaging Technologie, bei der zwei oder mehr Packages gestapelt werden.

³ SoP ist eine 3D-Packaging Technologie, bei dem ICs auf einem Substrat gestapelt werden.

⁴ Die – Bezeichnung für einen ungehäuteten Halbleiter-Chip.

⁵ Der thermische Ausdehnungskoeffizient gibt an, wie sehr sich die Abmessungen eines Materials bei einer Temperaturänderung vergrößern oder verkleinern. Ist der Koeffizient groß, so ändern sich die Abmessungen stärker im Vergleich zu einem Material mit kleineren Koeffizienten. Kupfer hat einen thermischen bei 300K von $15,6 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$ [51]. Der von Silizium ist ca. 4,3-fach kleiner und beträgt $3,6 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$ [51].

rungen, Hohlräumen und Rissen [7] oder zur Diffusion von Dotanden [8] führen. Dies hat einen Einfluss auf den „Hot carrier“-Effekt [9], welcher die Performance vorhandener Transistoren beeinflusst [10,11,12]. Daher ist es wichtig, den Spannungszustand im Silizium detailliert zu untersuchen.

Durch die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Kupfer und Silizium können Kupferprotrusionen entstehen und zu Defekten im BEoL-Schichtaufbau führen (Abbildung 1-1). Defekte im Kupfer der TSVs und Delaminierungserscheinungen an den Grenzschichten zwischen Kupfer und Silizium könnten diesen Effekt verstärken. Aus diesem Grund wird eine Methode benötigt, die es erlaubt Defekte und Delaminierungserscheinungen zu detektieren.

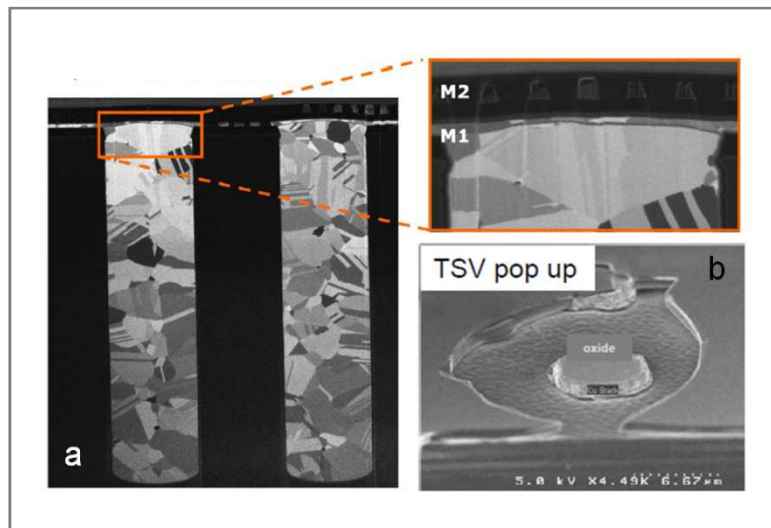


Abbildung 1-3: Defektbildung durch Kupferprotrusion Kupferprotrusionen können den BEoL-Schichtaufbau (Metallebene 1 = M1 und Metallebene 2 = M2) anheben (Abbildung a [13]). Dies kann im schlimmsten Fall zum sogenannten „pop up“ Effekt führen (Abbildung b [14]), bei dem der Schichtaufbau durchbrochen wird.

1.2 Ziele und Gliederung der Arbeit

Ziele

- Einarbeitung in die theoretischen Grundlagen zur Raman-Spektroskopie und Berechnung von Spannungen aus Raman-Frequenzverschiebungen
- Oberflächennahe Untersuchungen verschiedener Einflussfaktoren auf den Spannungszustand des Siliziums in der Nähe von TSV-Strukturen
- Charakterisierung der Tiefenabhängigkeit der Spannungen
- Entwicklung einer Methode zur Untersuchung von oberflächennahen Defekten und Delaminierungseffekten an TSV-Strukturen

Gliederung

Diese wissenschaftliche Arbeit untersucht das Spannungsverhalten an TSV-Strukturen mittels μ -Raman-Spektroskopie. Sie ist in fünf Kapitel aufgeteilt. Die theoretischen Grundlagen für Spannungsuntersuchungen mithilfe der μ -Raman-Spektroskopie werden im Kapitel 2 erarbeitet und erläutert. Kapitel 3 beschäftigt sich mit dem Aufbau und den Herstellungsprozessen der vorliegenden TSV-Proben und enthält Informationen zum verwendeten Messaufbau. Mechanische Spannungen, die durch Herstellungsprozesse und den TSV-Aufbau im Silizium in der Nähe dieser Strukturen entstehen können, werden in Kapitel 4 untersucht und diskutiert. Außerdem umfasst dieses Kapitel eine Methode zum Nachweis von Defekten und Delaminierungserscheinungen an TSV-Strukturen. Abschließend werden alle Ergebnisse im fünften Kapitel zusammengefasst. Am Ende der Arbeit wird ein Ausblick für weitere Untersuchungen auf dem Gebiet gegeben.

2. Theoretische Grundlagen

2.1 Methoden der Spannungsuntersuchung in Festkörpern

In der Festkörperanalytik gibt es unterschiedliche Verfahren, die für die Analyse von Gitterstruktur und Spannungszustand im Silizium eingesetzt werden. Eine Möglichkeit, die Gitterstruktur zu untersuchen, ist der Einsatz von X-Ray-Diffraction (XRD). XRD wird zu den zerstörungsfreien Untersuchungsmethoden gezählt. Die Tiefenauflösung (TA) beträgt $\sim 10\mu\text{m}$ und die laterale Auflösung (LA) ist bei „High-Resolution“-XRD (HRXRD) auf ca. $10\mu\text{m} \times 10\mu\text{m}$ begrenzt [15]. Der Einsatz der „Convergent Beam Electron Diffraction“-Technik (CBED) ist in Hinblick auf die laterale Auflösung deutlich besser geeignet. Es ist damit möglich, Strukturbreiten von einigen Nanometern zu untersuchen. Der Nachteil dieser Untersuchungsmethode liegt im Präparationsaufwand. Des Weiteren kann es bei der Probenpräparation zu Spannungsrelaxationen kommen. Eine andere zerstörungsfreie Untersuchungsmethode ist die μ -Raman-Spektroskopie. Sie beruht auf dem Effekt der inelastischen Photonenstreuung. Die Tiefenauflösung kann durch Variation der Wellenlänge des einstrahlenden monochromatischen Lichtes im Bereich einiger hundert Nanometer bis einiger Mikrometer gesteuert werden. Die laterale Auflösung ist aufgrund der Beugungsgrenze von Licht auf ca. 300nm begrenzt, kann aber durch den Einsatz von „Tip Enhanced Raman Spectroscopy“ (TERS) auf ca. $80\text{-}100\text{nm}$ reduziert werden [16]. In Tabelle 2-1 sind die Vor- und Nachteile der jeweiligen Methoden aufgelistet.

Tabelle 2-1 Ausgewählte Methoden der Spannungsmessung in Festkörpern [15]

| Methode | Effekt | Vorteile | Nachteile |
|----------------|-------------------------------|---|---|
| HRXRD | Röntgenbeugung | zerstörungsfrei | LA $10\mu\text{m} \times 10\mu\text{m}$ TA $10\mu\text{m}$ |
| CBED | Elastische Elektronenstreuung | LA $1\mu\text{m} \times 1\text{nm}$ TA $0\text{-}200\text{nm}$ | Hoher Präparationsaufwand |
| μ -Raman | Inelastische Photonenstreuung | zerstörungsfrei TA $0.2\text{-}3\mu\text{m}$ | LA $0.3\mu\text{m} \times 0.3\mu\text{m}$ |
| TERS | Inelastische Photonenstreuung | zerstörungsfrei LA 50nm | zeitlicher Aufwand für Spitzenpräparation |

Für die Untersuchung des Spannungszustandes an den TSV-Strukturen, die Abmessungen im Mikrometerbereich haben, muss die Methode eine gute laterale Auflösung haben. Außerdem muss das Analyseverfahren zerstörungsfrei sein, da Vergleichsmessungen an derselben Struktur durchgeführt werden sollen. Zudem sollte der zeitliche Aufwand für Präparation und Messung gering sein. Aus diesem Grund wurde für die Analyse des Spannungszustandes an TSV-Strukturen die Methode der μ -Raman-Spektroskopie ausgewählt.

2.2 Raman-Spektroskopie

Der österreichische Physiker A. Smekal (1895-1959) sagte den Effekt der Raman-Streuung 1923 voraus [48]. Dieser wurde fünf Jahre später durch den indischen Physiker C.V. Raman (1888-1970) und seinen Kollegen K.S. Krishnan (1898-1961) erstmalig wie folgt beschrieben:

[...] The experiments we have made have shown that in every case in which light is scattered by the molecules in dust-free liquids or gases, the diffuse radiation of the ordinary kind, having the same wavelength as the incident beam, is accompanied by a modified scattered radiation of degraded frequency. [...] [17]

In den folgenden Jahrzehnten gewann die Methode der Raman-Spektroskopie immer mehr an Bedeutung und wird heute in vielen Bereichen der Materialuntersuchungen eingesetzt [18,19]. Sie beruht auf dem Effekt der inelastischen Streuung von Licht durch ein Molekül oder in einem Festkörper.

2.2.1 Prinzip des Raman-Streuprozesses

In der Physik können zwei Arten von Streuprozessen bei der Wechselwirkung einer elektromagnetischen Welle mit Materie beobachtet werden. Trifft monochromatisches Licht auf Materie, so wird es entweder elastisch oder inelastisch gestreut. Im Fall der elastischen Streuung, welche die höhere Wahrscheinlichkeit hat, besitzt das gestreute Photon die gleiche Frequenz wie vor dem Zusammenstoß. Dieser Vorgang wird als Rayleigh-Streuung bezeichnet. Die inelastische Streuung tritt im Vergleich zur Rayleigh-Streuung ungefähr 10^6 -mal seltener auf [20]. Hierbei steigt oder sinkt die Fre-

quenz des Photons bei dem Streuprozess (Rot- und Blauverschiebung). In diesem Fall spricht man von Raman-Streuung.

Wird der Effekt der Raman-Streuung auf Molekülebene betrachtet, so wird, durch das einfallende elektrische Feld E des Lasers, ein Dipolmoment μ' im Molekül induziert und ist durch:

$$\mu' = \alpha E \quad (2-1)$$

gegeben. α stellt die Polarisierbarkeit des Moleküls dar.

Die Polarisierbarkeit eines Moleküls ist grundsätzlich von der Distanz und Bindungsstärke der Elektronen und der Atomkerne abhängig. Ist die Entfernung gering, so hat das einfallende elektrische Feld einen geringeren Einfluss. Folglich kann die Polarisierbarkeit des Moleküls durch Veränderung der Molekülschwingung mit einer Frequenz ν_k beeinflusst werden. Der Index k steht hierbei für die drei Raumrichtungen x , y und z . Es ergibt sich für die Veränderung der Polarisierbarkeit α_k mit der Normalkoordinate x_k^0 des Systems:

$$\alpha_k = \alpha_0 + \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \right)_0 x_k^0 + \dots \quad (2-2)$$

wobei x_k^0 von der Zeit und Frequenz der Schwingung ν_k abhängig ist (2-3).

$$x_k(t) = x_0 \cos 2\pi\nu_k t \quad (2-3)$$

Die Taylorreihe (2-2) ist auf die ersten beiden Terme beschränkt, da höhere Ordnungen Multi-Phononen-Prozesse, die aufgrund ihrer geringen Wahrscheinlichkeit hier nicht berücksichtigt werden sollen, beschreiben. Setzt man nun Gleichung (2-3) in (2-1) ein und beschreibt das elektrische Feld E mit:

$$E = E_0 \cos 2\pi\nu_0 t \quad (2-4)$$

dann ergibt sich für das induzierte Dipolmoment μ'_k des Moleküls:

$$\mu'_k = \alpha_0 E_0 \cos 2\pi\nu_0 t + \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \right)_0 x_k^0 \cdot E_0 \cos 2\pi\nu_0 \cdot t \cos 2\pi\nu_k t. \quad (2-5)$$

Durch Umformung der Gleichung (2-5) ergibt sich:

$$\begin{aligned} \mu'_k &= \alpha_0 E_0 \cos 2\pi\nu_0 t \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \right)_0 x_k^0 \cdot E_0 [\cos 2\pi(\nu_0 - \nu_k)t] \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial x_k} \right)_0 x_k^0 \cdot E_0 [\cos 2\pi(\nu_0 + \nu_k)t]. \end{aligned} \quad (2-6)$$

Der erste Term der Gleichung (2-6) beschreibt die Rayleigh-Streuung. Die Raman-Streuung wird in Stokes- und Anti-Stokes-Anteil aufgeteilt. Diese können durch den zweiten und dritten Term in der Gleichung beschrieben werden [21]. Die Frequenz der gestreuten Strahlung ist bei der Stokes-Streuung geringer als die der einfallenden Strahlung ($\nu_{\text{Stokes}} = \nu_0 - \nu_k$). Im Falle der Anti-Stokes-Streuung kommt es zu einer Frequenzerhöhung ($\nu_{\text{Anti-Stokes}} = \nu_0 + \nu_k$).

2.2.2 Raman-Tensor und Auswahlregeln

In Gleichung (2-5) wird deutlich, dass es nur zur Raman-Streuung kommt, wenn die Ableitung $(\partial\alpha/\partial x_k)$, welche man auch als Raman-Tensor beschreiben kann, ungleich Null ist. Betrachtet man die Raman-Intensität I , erkennt man auch hier die Abhängigkeit vom Raman-Tensor R_j [22].

$$I = C \cdot \sum_j |e_i \cdot R_j \cdot e_s|^2; j = x, y, z \quad (2-7)$$

Die Streuintensität ist dabei von der Konstanten C , sowie von den Einheitsvektoren e_i und e_s , welche die Polarisierungsrichtung der einfallenden beziehungsweise der gestreuten Strahlung darstellen, und dem Raman-Tensor R_j abhängig. Die drei Raman-Tensoren können für das kubische Kristallgitter des Siliziums im kartesischen Koordinatensystem mit $x=[100]$, $y=[010]$ und $z=[001]$ wie folgt beschrieben werden [22]:

$$R_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; R_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; R_z = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2-8)$$

Wird die monochromatische Strahlung auf die $[001]$ -Ebene senkrecht eingestrahlt, beschreiben R_x sowie R_y die Wechselwirkung mit den sogenannten transversalen optischen Phononen (TO) die entlang der x - beziehungsweise y -Achse polarisiert sind. Die

longitudinalen optischen Phononen (LO), die entlang der z-Achse polarisiert sind, werden durch den Tensor R_z bestimmt [23]. Diese Zusammenhänge werden zusammenfassend als Auswahlregeln für die Raman-Streuung bezeichnet. Ausgehend von Gleichung (2-7) und (2-8) kann ermittelt werden, welche optischen Phononen bei einer gegebenen Strahlpolarisation aktiv sind. In Tabelle 2-2 sind die Auswahlregeln für verschiedene Strahlpolarisationen, sowie die in den Experimenten verwendeten Oberflächenebenen (001) und (110) angegeben.

Tabelle 2-2 Raman-Auswahlregeln für (001) und (110) Oberflächen [23]

| Polarisation | | aktiv (x)/ inaktiv (-) | | |
|--------------------|-------|------------------------|-------|-------|
| E_i | E_s | R_x | R_y | R_z |
| Streuung von (001) | | | | |
| (100) | (100) | - | - | - |
| (100) | (010) | - | - | x |
| (110) | (110) | - | - | x |
| (110) | (110) | - | - | - |
| Streuung von (110) | | | | |
| (110) | (001) | x | x | - |
| (110) | (110) | - | - | x |
| (001) | (001) | - | - | - |

2.2.3 Zusammenhang zwischen Phononen und Dehnung

Die vorangestellten Betrachtungen gehen von einem ungestörten kubischen Kristallsystem aus. Wird das Kristallsystem durch einen äußeren Einfluss, zum Beispiel mechanische Spannungen, die durch eine auf dem Silizium-Substrat liegende Schicht verursacht werden, beeinflusst, so ändern sich die Eigenschaften der Phononen. Die ersten theoretischen Arbeiten auf diesem Gebiet wurden durch Ganesan et al. [24] veröffentlicht und durch Anastassakis et al. 1970 experimentell bestätigt [25]. In Anwesenheit einer Spannung wird die Kristallgitterstruktur gestaucht oder gestreckt und die Frequenzen der drei optischen Phononen ($k=0$) werden verändert. Sie können nach [24,26,27] durch folgende Gleichung beschrieben werden:

$$\sum_{\beta} K_{\alpha\beta} \cdot \eta_{\beta} = \omega^2 \cdot \eta_{\alpha}, \quad \alpha, \beta = 1 - 3. \quad (2-9)$$

Hierbei sind η_α und η_β kartesische Koordinaten der Eigenvektoren, ω ist die Frequenz der Raman-Mode in der Anwesenheit einer Dehnung und $K_{\alpha\beta}$ sind Elemente des Kraftkonstanten-Tensors. Der Koeffizient $K_{\alpha\beta}$ kann in Hinsicht auf Dehnung des Systems in nachfolgende Form erweitert werden:

$$K_{\alpha\beta} = K_{\alpha\beta}^0 + \sum_{\nu\nu} \varepsilon_{\nu\nu} \cdot K_{\nu\nu\alpha\beta}^{(\varepsilon)}, \quad K_{\alpha\beta}^0 = \omega_0^2 \cdot \delta_{\alpha\beta}. \quad (2-10)$$

$\varepsilon_{\nu\nu}$ beschreibt hierbei Elemente des elastischen Dehnungstensors ε . Das Kronecker Delta wird durch $\delta_{\alpha\beta}$ beschrieben und die Raman-Frequenz des nicht gedehnten Kristallgitters wird durch ω_0 beschrieben.

Betrachtet man den Tensor der 4. Stufe $K^{(\varepsilon)}$ in Hinsicht auf Silizium mit seiner kubischen Struktur, dann ergeben sich aus Symmetriegründen drei unabhängige Elemente [26]:

$$\begin{aligned} K_{1111}^{(\varepsilon)} &= K_{2222}^{(\varepsilon)} = K_{3333}^{(\varepsilon)} = p, \\ K_{1122}^{(\varepsilon)} &= K_{1133}^{(\varepsilon)} = K_{2233}^{(\varepsilon)} = q, \\ K_{1212}^{(\varepsilon)} &= K_{1313}^{(\varepsilon)} = K_{2323}^{(\varepsilon)} = r. \end{aligned} \quad (2-11)$$

Alle anderen Elemente des Tensors sind Null. Die Koeffizienten p , q und r werden auch als Phononen-Deformations-Potentiale (PDPs) bezeichnet und sind materialabhängig. Durch Kombination der Gleichungen (2-10) und (2-11) ergibt sich folgende Matrix:

$$M = \begin{vmatrix} p\varepsilon_{11} + q(\varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) & 2r\varepsilon_{12} & 2r\varepsilon_{13} \\ 2r\varepsilon_{12} & p\varepsilon_{22} + q(\varepsilon_{33} + \varepsilon_{11}) & 2r\varepsilon_{23} \\ 2r\varepsilon_{13} & 2r\varepsilon_{23} & p\varepsilon_{33} + q(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}) \end{vmatrix} \quad (2-12)$$

Die drei Phononenfrequenzen ω_{1-3} können durch die Eigenwerte der Matrix mit folgender Gleichung bestimmt werden:

$$\begin{vmatrix} p\varepsilon_{11} + q(\varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) - \lambda & 2r\varepsilon_{12} & 2r\varepsilon_{13} \\ 2r\varepsilon_{12} & p\varepsilon_{22} + q(\varepsilon_{33} + \varepsilon_{11}) - \lambda & 2r\varepsilon_{23} \\ 2r\varepsilon_{13} & 2r\varepsilon_{23} & p\varepsilon_{33} + q(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}) - \lambda \end{vmatrix} = 0 \quad (2-13)$$

wobei die Eigenwerte λ_j durch folgende Beziehung mit der Raman-Frequenzverschiebung verknüpft sind:

$$\lambda_j = \omega_{s,j}^2 - \omega_{0,j}^2, \quad j = 1 - 3. \quad (2-14)$$

Hierbei bezeichnet $\omega_{s,j}$ die Phononenfrequenz bei einer verspannten Gitterstruktur und $\omega_{0,j}$ die Frequenzen bei einer ungestörten Gitterstruktur. Mit der Annahme, dass die Frequenzänderung $\Delta\omega$ gegenüber ω_0 viel kleiner ist, ergibt sich aus (2-14):

$$\Delta\omega_j = \frac{\lambda_j}{2\omega_{0,j}}. \quad (2-15)$$

Die Phononenfrequenzen ω_1 und ω_2 sind mit den Raman-Tensoren R_x und R_y verknüpft. Ihre Aktivität hängt dadurch von den Auswahlregeln der transversalen optischen Phononen ab. Folglich ist die dritte Frequenz ω_3 abhängig von dem Raman-Tensor R_z und gehört zu den longitudinalen optischen Phononen.

Die bisherigen Betrachtungen beziehen sich auf ein kartesisches Koordinatensystem mit $x=[100]$, $y=[010]$ und $z=[001]$. Die meisten mikroelektronischen Schaltungen werden auf einem Wafer mit der Orientierung $x=[110]$, $y=[\bar{1}10]$ und $z=[001]$ gefertigt. Auch die Spannungen, die z.B. an Kanten dünner Filme entstehen, haben somit eine entsprechende Vorzugsrichtung. Die Betrachtungen zur Spannungsberechnung müssen dementsprechend angepasst werden. Dafür wird die Gleichung (2-9) im Probenkoordinatensystem gelöst. Dies kann durch Drehung des Kristallkoordinatensystems um 45° erreicht werden. Es ergibt sich:

$$x' = \frac{1}{\sqrt{2}} [110] \quad y' = \frac{1}{\sqrt{2}} [\bar{1}10] \quad z' = [001]. \quad (2-16)$$

Laut Anastassakis [28] und De Wolf [26,27] können zwei Wege benutzt werden, um die spannungsinduzierten Raman-Moden-Verschiebung zu berechnen. Im ersten Fall geht man von dem Dehnungstensor oder dem Spannungstensor im Probensystem aus, berechnet anschließend den Dehnungstensor im Referenzsystem und löst somit die säkulare Gleichung. Der zweite Fall beschreibt die Berechnung der säkularen Matrix im Probensystem. Es folgt die Berechnung der Phononenfrequenzverschiebung durch das Einsetzen des Dehnungstensors in die säkulare Gleichung. Die Lösung des Problems über den zweiten Fall wird von De Wolf als „generell weniger kompliziert“ beschrieben [26]. Aus diesem Grund erfolgen die Berechnungen im folgenden Kapitel über den zweiten Fall.

Ausgehend von Gleichung (2-9) wird die säkulare Gleichung im Probensystem durch Rotation des Tensors $K^{(\varepsilon)}$ wie folgt beschrieben [26]:

$$K'_{\alpha\beta} = K'_{\alpha\beta}{}^0 + \sum_{\nu\nu} \varepsilon'_{\nu\nu} \cdot K'_{\nu\nu\alpha\beta}^{(\varepsilon)}, \quad K'_{\alpha\beta}{}^0 = \omega_0^2 \cdot \delta_{\alpha\beta}. \quad (2-17)$$

Die Tensor-Elemente $K'_{\nu\nu\alpha\beta}^{(\varepsilon)}$, welche ungleich Null sind, werden durch:

$$\begin{aligned} K'_{3333}^{(\varepsilon)} &= p, & K'_{1111}^{(\varepsilon)} &= K'_{2222}^{(\varepsilon)} = p', \\ K'_{1122}^{(\varepsilon)} &= q', & K'_{1133}^{(\varepsilon)} &= K'_{2233}^{(\varepsilon)} = q, \\ K'_{1212}^{(\varepsilon)} &= \frac{p+q}{2}, & K'_{1313}^{(\varepsilon)} &= K'_{2323}^{(\varepsilon)} = r \end{aligned} \quad (2-18)$$

mit

$$p' = \frac{p+q}{2} + r, \quad q' = \frac{p+q}{2} - r \quad (2-19)$$

beschrieben. Die säkulare Matrix des Probensystems ergibt sich zu:

$$\begin{vmatrix} p'\varepsilon'_{11} + q'\varepsilon'_{22} + q\varepsilon'_{33} - \lambda & (p-q)\varepsilon'_{12} & 2r\varepsilon'_{13} \\ (p-q)\varepsilon'_{12} & q'\varepsilon'_{11} + p'\varepsilon'_{22} + q\varepsilon'_{33} - \lambda & 2r\varepsilon'_{23} \\ 2r\varepsilon'_{13} & 2r\varepsilon'_{23} & p\varepsilon'_{33} + q(\varepsilon'_{11} + \varepsilon'_{22}) - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (2-20)$$

2.2.4 Modellannahmen zum Spannungstensor

Bei Betrachtung von Tabelle 2-2 wird deutlich, dass bei der spektroskopischen Untersuchung einer (001)-Oberfläche nur die dritte (ω_3) der drei Moden messbar ist. Daraus folgt, dass für die Lösung des dreidimensionalen Spannungszustandes, welcher aufgrund von Symmetriegründen aus sechs unabhängigen Komponenten besteht, diverse Annahmen und Vereinfachungen bezüglich des Spannungszustandes getroffen werden müssen. Das einfachste Modell ist die Annahme eines uniaxialen Spannungszustandes, z.B. im Zentrum, unterhalb eines Siliziumnitridfilmes. Werden die Kanten des Filmes auf den Spannungszustand hin untersucht, kommt eine zusätzliche Komponente σ_z hinzu [29]. Dieser Kantenbereich kann durch ein biaxiales Spannungsmodell beschrieben werden. Die Berechnungen werden dadurch komplexer. Für einen in y-Richtung unendlich langen Film muss auch die dritte Komponente σ_y einbezogen werden. Es ergibt sich somit ein triaxialer Spannungszustand.

Im vorangegangenen Kapitel (2.2.3) ist erläutert, wie die Phononenfrequenzverschiebung mit der Dehnung der Kristallstruktur verknüpft ist. Für die Berechnung des Spannungszustandes wird das Hookesche Gesetz herangezogen. Dieses Gesetz verknüpft den Elastizitätstensor C und den Dehnungstensor ε zum Spannungstensor σ .

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (2-21)$$

Durch Bildung der inversen Matrix S_{ijkl} (2-22) kann das Hookesche Gesetz nach ε_{kl} umgestellt werden (2-23).

$$S_{ijkl} = C_{ijkl}^{-1} \quad (2-22)$$

$$\varepsilon_{kl} = S_{ijkl} \sigma_{ij} \quad (2-23)$$

Uniaxialer Spannungszustand

Die Berechnung des Zusammenhanges zwischen Phononenfrequenzverschiebung und dem Spannungstensor σ für einen uniaxialen Spannungszustand (2-24) wird exemplarisch nach [26] hergeleitet.

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2-24)$$

Die Beziehung zwischen Dehnungstensor und Spannungstensor ist in Gleichung (2-23) dargestellt, wobei S_{ijkl} im kubischen Kristallsystem wie folgt beschrieben ist:

$$S_{ijkl} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}S_{44} \end{pmatrix}. \quad (2-25)$$

Beachtet man die Drehung des Systems, ergibt sich der Elastizitätstensor S'_{ijkl} ausgehend von Gleichung (2-25) zu:

$$S'_{ijkl} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(S_{11} + S_{12}) + \frac{1}{4}S_{44} & \frac{1}{2}(S_{11} + S_{12}) - \frac{1}{4}S_{44} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}(S_{11} + S_{12}) - \frac{1}{4}S_{44} & \frac{1}{2}(S_{11} + S_{12}) + \frac{1}{4}S_{44} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{4}S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(S_{11} - S_{21}) \end{pmatrix} \quad (2-26)$$

Der Dehnungstensor ε'_{kl} kann durch Kombination von Gleichung (2-24) und (2-26) bestimmt werden.

$$\varepsilon'_{kl} = \sigma_{xx} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(S_{11} + S_{12}) + \frac{1}{4}S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}(S_{11} + S_{12}) - \frac{1}{4}S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & S_{12} \end{pmatrix} \quad (2-27)$$

Durch Lösung der Matrix (2-20) mit Hilfe von (2-27) ergeben sich die drei Eigenwerte λ_j zu:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{1}{2}\sigma_{xx} \left[(p + q)S_{11} + (p + 3q)S_{12} + \frac{1}{2}rS_{44} \right] \\ \lambda_2 &= \frac{1}{2}\sigma_{xx} \left[(p + q)S_{11} + (p + 3q)S_{12} - \frac{1}{2}rS_{44} \right] \\ \lambda_3 &= \sigma_{xx} [pS_{12} + q(S_{11} + S_{12})]. \end{aligned} \quad (2-28)$$

Unter Betrachtung der Gleichung (2-7), der ebenfalls gedrehten Raman-Tensoren (2-29) und der senkrecht zur (001)-Oberfläche stehende Polarisationsvektoren e_i und e_s , wird deutlich, dass nur die dritte Mode sichtbar ist.

$$R'_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}; R'_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}; R'_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2-29)$$

Somit kann die Verbindung zwischen einer experimentell bestimmten Raman-Verschiebung und der Spannung im Silizium durch Einsetzen des Eigenwertes λ_3 (2-28) in Gleichung (2-15) erreicht werden.

$$\Delta\omega_3 = \frac{\sigma_{xx}}{2\omega_0} [pS_{12} + q(S_{11} + S_{12})] \quad (2-30)$$

Für die Lösung des Gleichungssystems werden die materialspezifischen PDPs (p , q und r), sowie Elastizitätskonstanten S_{ij} für Silizium¹ benötigt. In der Literatur gibt es verschiedene theoretische und experimentelle Angaben von verschiedenen Autoren für die PDPs [30,31]. Für den uniaxialen Spannungszustand gilt ausgehend von (2-30) folgende Gleichung:

$$\Delta\omega = -S \times \frac{\text{cm}^{-1}}{\text{GPa}} \sigma_{xx}. \quad (2-31)$$

Die Werte für den Sensitivitätsfaktor S variieren je nach Quelle zwischen 2,01 und 2,29. In einer früheren Untersuchung von M. Hecker et al. [32] wurden Spannungszustände in SiGe-Schichten durch die Methoden der μ -Raman-Spektroskopie und XRD untersucht. Dabei wurde ein Sensitivitätsfaktor von 2,13 ermittelt. Dies entspricht einer Abweichung von 7% zu den Werten von Anastassakis ($S=2,29$). Wird diese Abweichung für die Berechnung der PDPs ausgehend von den PDPs der Quelle [47] zu Grunde gelegt, ergeben sich für $p=-1,72/\omega_0^2$ und für $q=-2,15/\omega_0^2$. Eine Raman-Verschiebung von $\Delta\omega= 1\text{cm}^{-1}$ wird demzufolge durch eine uniaxiale Druckspannung von 470MPa erzeugt ((2-31) mit $S=2,13$). Dieser Wert wird für alle Spannungsberechnungen im Kapitel 4 genutzt.

¹ $S_{11} = 7,68 \text{ TPa}^{-1}$ und $S_{12} = -2,14 \text{ TPa}^{-1}$ [46]

Biaxialer spurfreier Spannungszustand

Wie bereits erwähnt, ist der uniaxiale Spannungszustand die einfachste Annahme bei der Berechnung von Spannungen aus Raman-Verschiebungen. Wird der Aufbau der zu untersuchenden Proben (Kapitel 3) genauer betrachtet, wird deutlich, dass dieses Modell eine erste Näherung ist. Ein anderer Ansatz ist der biaxiale spurfreie Spannungszustand, der durch folgenden Spannungstensor gekennzeichnet ist:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & -\sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2-32)$$

Dieser Ansatz ist auf analytische, zweidimensionale Modellierungen an TSV-Strukturen durch die Forschungsgruppe um Paul Ho von der University of Texas zurückzuführen [33].

Berechnet man den Dehnungstensor ε'_{kl} über die Beziehung (2-21) mit (2-26) und (2-32), ergibt sich folgende Matrix:

$$\varepsilon_{kl}' = \sigma_{xx} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2-33)$$

Durch anschließendes Lösen der säkularen Gleichung (2-20) mittels (2-33) ergibt sich für den dritten Eigenwert λ_3 :

$$\lambda_3 = 0 \quad (2-34)$$

Da aufgrund der Strahlgeometrie auf der (001) Oberfläche nur die longitudinalen optischen Phononen gemessen werden (siehe Kapitel 2.2.2), wird nach Gleichung (2-15) $\Delta\omega$ Null. Die experimentellen Ergebnisse (Kapitel 4) zeigen aber eine Frequenzänderung $\Delta\omega$ die ungleich Null ist. Daraus folgt, dass der Ansatz des biaxialen spurfreien Spannungszustandes kein geeignetes Modell für die Untersuchungen darstellt.

Biaxialer spurfreier Spannungszustand mit Offset

Erweitert man den biaxialen spurfreien Spannungszustand mit der Annahme, dass die Elemente σ_{xx} und σ_{yy} des Spannungstensors um σ_{Δ} voneinander verschieden sind, ergibt sich folgende Spannungsmatrix:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & -\sigma_{xx} + \sigma_{\Delta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2-35)$$

Der Dehnungstensor errechnet sich dann über (2-21) mit (2-26) und (2-35) zu:

$$\varepsilon_{kl}' = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}S_{44}\sigma_{xx} + \left[\frac{1}{2}(S_{11} + S_{12}) - \frac{1}{4}S_{44}\right]\sigma_{\Delta} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}S_{44}\sigma_{xx} + \left[\frac{1}{2}(S_{11} + S_{12}) - \frac{1}{4}S_{44}\right]\sigma_{\Delta} & 0 \\ 0 & 0 & S_{12}\sigma_{\Delta} \end{pmatrix} \quad (2-36)$$

Die Lösung des dritten Eigenwertes λ_3 erfolgt wiederum über die säkulare Gleichung (2-20) und (2-36). Der Eigenwert wird anschließend in Gleichung (2-15) eingesetzt.

$$\Delta\omega_3 = \frac{\sigma_{\Delta}}{2\omega_0} [pS_{12} + q(S_{11} + S_{12})] \quad (2-37)$$

Diese Frequenzänderung ist identisch mit der des uniaxialen Spannungsmodells (2-30), mit welchem die gesamte Auswertung der Versuchsergebnisse in Kapitel 4 durchgeführt wird. Trifft man die Annahme, dass die Differenz σ_{Δ} zu σ_{xx} klein ist (<10%), würden die Spannungswerte für σ_{xx} dementsprechend sehr groß werden. Bei einer Differenz von 100MPa und der Annahme, dass die Abweichung zwischen σ_{Δ} zu σ_{xx} 10 Prozent beträgt, würde der reale Spannungswert σ_{xx} 1GPa betragen. Da bei Kupfer ab einem Spannungswert von maximal 400-500MPa eine plastische Verformung¹ einsetzt, ist es nicht möglich einen solchen Spannungswert im Silizium zu erzeugen. Wenn man die Differenzspannung σ_{Δ} entsprechend groß (>25%) wählt, sind die im Verlauf dieser Arbeit experimentell bestimmten Messwerte nachvollziehbar. Trotzdem kann nicht mehr von einem biaxialen spurfreien Spannungsmodell gesprochen werden.

¹ Der Wert kann je nach Zusammensetzung des Kupfers variieren. Werte für verschiedene Legierungen können auf <http://www.kupferinstitut.de> nachgeschlagen werden.

Triaxialer Spannungszustand

Betrachtet man den Aufbau der vorliegenden Probe mit dem dielektrischen Schichtaufbau und den Geometrieänderungen des TSV an der Oberfläche, wird deutlich, dass der Einfluss der dritten Spannungskomponente σ_{zz} nicht mehr zu vernachlässigen ist. Bei dem Modell des triaxialen Spannungszustandes werden die Scherelemente σ_{yx} , σ_{yz} und σ_{xz} vernachlässigt:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (2-38)$$

Der Dehnungstensor errechnet sich dann über (2-21) mit (2-26) und (2-38) zu:

$$\varepsilon_{kl}' = \begin{pmatrix} \varepsilon'_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon'_{22} & 0 \\ 0 & 0 & S_{12}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + S_{11}\sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad (2-39)$$

mit

$$\begin{aligned} \varepsilon'_{11} &= \left[\frac{1}{2}(S_{11} + S_{12}) + \frac{1}{4}S_{44} \right] \sigma_{xx} + \left[\frac{1}{2}(S_{11} + S_{12}) - \frac{1}{4}S_{44} \right] \sigma_{yy} + S_{12}\sigma_{zz} \\ \varepsilon'_{22} &= \left[\frac{1}{2}(S_{11} + S_{12}) - \frac{1}{4}S_{44} \right] \sigma_{xx} + \left[\frac{1}{2}(S_{11} + S_{12}) + \frac{1}{4}S_{44} \right] \sigma_{yy} + S_{12}\sigma_{zz}. \end{aligned} \quad (2-40)$$

Der Eigenwert λ_3 ergibt sich über die säkulare Gleichung (2-20) zu:

$$\begin{aligned} \lambda_3 &= p[S_{12}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + S_{11}\sigma_{zz}] \\ &\quad + q[(S_{11} + S_{12})(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + 2S_{12}\sigma_{zz}]. \end{aligned} \quad (2-41)$$

Durch Kombination mit Gleichung (2-15) ergibt sich die Frequenzänderung zu:

$$\begin{aligned} \Delta\omega_3 &= \frac{1}{2\omega_0} p[S_{12}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + S_{11}\sigma_{zz}] \\ &\quad + q[(S_{11} + S_{12})(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + 2S_{12}\sigma_{zz}]. \end{aligned} \quad (2-42)$$

Die Berechnung der Frequenzverschiebung erfolgt mithilfe der PDPs und der elastischen Konstanten. Trifft man nun weitere Annahmen, um die einzelnen Spannungskomponenten zu verknüpfen, ist es möglich aus einer Frequenzverschiebung Rückschlüsse auf die Verteilung und somit auch den Absolutwert der einzelnen Komponenten zu ziehen.

2.2.4 Räumliche Auflösung

Das gesamte inelastisch gestreute Licht, welches über das Mikroskopobjektiv zurückgelangt und im Spektroskop analysiert wird, stammt aus einem bestimmten Messvolumen. Dieses Volumen ergibt sich aus der räumlichen xy-Auflösung sowie der Tiefenauflösung in z-Richtung. In diesem und im folgenden Abschnitt wird die räumliche bzw. Tiefenauflösung diskutiert.

Um die räumliche Auflösung des Lasers praktisch zu bestimmen, wurde eine Messreihe von Einzelmesspunkten über eine Struktur, bestehend aus Si-Substrat, Siliziumoxid sowie einer Kupferstruktur, nach [49] vorgenommen (Abbildung 2-1). Die Kupferkante verhindert eine Raman-Streuung des darunter liegenden Siliziums. Zu Beginn der Messreihe befindet sich das gesamte Laserprofil auf der Kupferstruktur, es ergibt sich keine messbare Intensität. Trifft das Strahlprofil auf die Kupferkante und auf das angrenzende Siliziumoxid, wird der auf das Siliziumoxid überlappende Teil von dem darunter liegenden Silizium inelastisch gestreut. Dies resultiert in einem messbaren, ansteigenden Intensitätssignal, je weiter der Laserstrahl in Richtung Siliziumoxid fortschreitet.

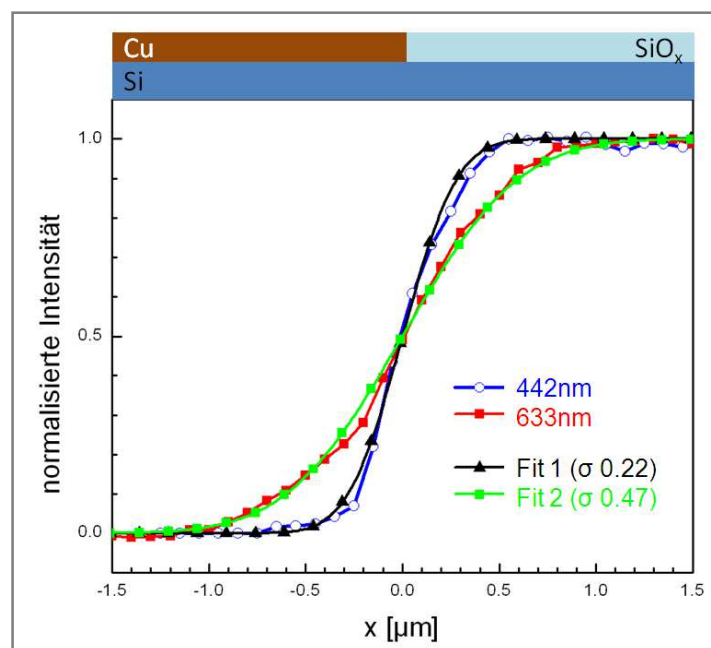


Abbildung 2-1 Intensitätsverlauf für die Bestimmung des Laserprofils. Der Laserstrahl läuft von einem Kupfer-Pad in einer Schrittweite von 0.1 µm auf das angrenzende Siliziumoxid.

Es wird angenommen, dass die Intensitätsverteilung des Lasers einer Gaußverteilung entspricht (2-43). Die Gaußverteilung wird numerisch integriert und mit Hilfe des Parameters σ anschließend an die aufgenommene Intensitätskurve angeglichen. Für die Messung der Breite werden unterschiedliche Kriterien wie z.B. FWHM¹, $1/e^2$ -Radius oder Durchmesser bei $1/e$ angesetzt. Die hier vorliegende Breite wurde bei $1/e$, also einem 36,8 prozentigen Abfall der maximalen Intensität, ermittelt². Somit ergibt sich für den verwendeten Laser der Wellenlänge 442nm und einer numerischen Apertur des Objektivs von NA=0.9 eine Breite w von ~620nm. In Tabelle 2-3 sind für alle verwendeten Wellenlängen die experimentell bestimmten Profildbreiten w angegeben.

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right)} \quad (2-43)$$

Tabelle 2-3 Laserspot-Profilbreite unterschiedlicher Laserwellenlängen

| Bezeichner | Einheit | λ_1 | λ_2 | λ_3 |
|------------|---------|-------------|-------------|-------------|
| λ | [nm] | 632,6 | 488,3 | 442,8 |
| σ | | 0,47 | 0,35 | 0,22 |
| w | [nm] | 1320 | 990 | 620 |

Das theoretische Limit der Fokusbreite kann auf Grundlage der Beugungsgrenze nach Ernst Abbe mit nachstehender Gleichung berechnet werden [34].

$$\Delta x = \frac{0.61\lambda}{N_A} \quad (2-44)$$

Δx ist der kleinste Abstand zweier benachbarter Strukturen, der mikroskopisch durch Licht der Wellenlänge λ bei einer verwendeten Numerischen Apertur N_A des Objektivs aufgelöst werden kann. Bei dem verwendeten experimentellen Aufbau liegt die theoretische Grenze bei ca. 300nm. Die Abweichung zwischen dem theoretischen (300nm) und dem experimentell bestimmten Wert (620nm) lässt sich durch Toleranzen im optischen Strahlengang erklären. Durch den Einsatz von Öllinsen oder sogenannten „solid immersion“-Linsen, welche eine numerische Apertur von 1,4 bis 2 haben, kann die Fokusbreite weiterhin verringert werden.

¹ FWHM – „Full width at half maximum“ Die Bestimmung der Breite der Funktion erfolgt nach 50% Abfall vom Maximalwert über die gesamte Breite der Funktion.

² $w = 2\sqrt{2}\sigma$

2.2.5 Tiefenauflösung

Aufgrund des Strukturaufbaus der Probe ist es zu erwarten, dass in z-Richtung ein Spannungsgradient existiert. Folglich ist die Bestimmung der Eindringtiefe der Photonen in das Silizium wichtig. Die Intensität I_S des Lichtes, welches aus dem Bereich zwischen der Tiefe d und der Oberfläche zurückgestreut wird, kann durch folgendes Integral ausgedrückt werden [35,36]:

$$I_S = I_0 D \int_0^d e^{-2\alpha'x} dx = \frac{I_0 D}{2\alpha'} (1 - e^{-2\alpha'd}). \quad (2-45)$$

I_0 , D und α' sind hierbei die gesamte auf die Probe eingestrahlte Intensität, das Ramanstreuprofil sowie der Absorptionskoeffizient bei einer definierten Laserwellenlänge. Die Intensität I_d des Lichts, welches aus einer Tiefe $t > d$ nicht zur Oberfläche zurückgestreut wird, kann durch Gleichung (2-46) beschrieben werden.

$$I_d = I_0 D \int_d^{\infty} e^{-2\alpha'x} dx = \frac{I_0 D}{2\alpha'} e^{-2\alpha'd} \quad (2-46)$$

Bei der Annahme, dass nur 10% des gesamten gestreuten Lichtes ($I_S + I_d$) aus dem Volumen zwischen der Oberfläche und der Tiefe d stammt, gilt nach [36]:

$$\frac{I_d}{I_d + I_S} = 0.1. \quad (2-47)$$

Die Eindringtiefe d_p ergibt sich zu:

$$d_p = -\frac{\ln 0.1}{2\alpha'} = \frac{1,15}{\alpha'}. \quad (2-48)$$

Unter Nutzung der Gleichung (2-48) und dem Absorptionskoeffizienten α' bei einer bestimmten Wellenlänge λ [37] ergibt sich die Eindringtiefe des Lichtes im Silizium (Tabelle 2-4).

Tabelle 2-4 Eindringtiefe des Lichtes in Silizium

| Bezeichner | Einheit | λ_1 | λ_2 | λ_3 |
|------------|-------------------------------|-------------|-------------|-------------|
| λ | [nm] | 632,6 | 488,3 | 442,8 |
| α' | [10^{-3} cm^{-1}] | 3,774 | 21,536 | 46,258 |
| d | [nm] | 3047,16 | 534,00 | 248,60 |

3. Experimentelle Grundlagen

3.1 Probenaufbau

Bei den vorliegenden Proben handelt es sich um TSV-Teststrukturen in der scribeline¹. Die TSVs haben einen Durchmesser von $10\mu\text{m}$, eine Tiefe von $100\mu\text{m}$ (Aspektverhältnis 10:1) und sind mit verschiedenen Pitches² von 20, 35 und $40\mu\text{m}$ in einer Linienform angeordnet (Abbildung 3-1). Für die folgenden Untersuchungen existieren mehrere Probenzustände. Proben, die nach Prozessschritt 10 (Abbildung 3-2) aus der Fertigung genommen werden, sind nachfolgend mit dem Probennamen „G“ bezeichnet. Vollständig prozessierte Proben werden mit „A“ benannt. Des Weiteren wurde ein Teil der Proben unter Schutzgas (Stickstoff) bei 250, 300 bzw. 380°C für eine Stunde getempert, um den Temperatureinfluss von BEoL-Prozessen zu simulieren. Die Dicke der vorliegenden Proben beträgt $780\mu\text{m}$. Für die Untersuchung einzelner Spannungsfaktoren sind einige Proben zurückprozessiert, d.h. es werden die dielektrischen Deckschichten mittels Fluorwasserstoff (HF) oder CMP³ abgetragen oder das Kupfer mittels einer Kombination aus Wasserstoffperoxid und Schwefelsäure aus den TSV-Gräben geätzt.

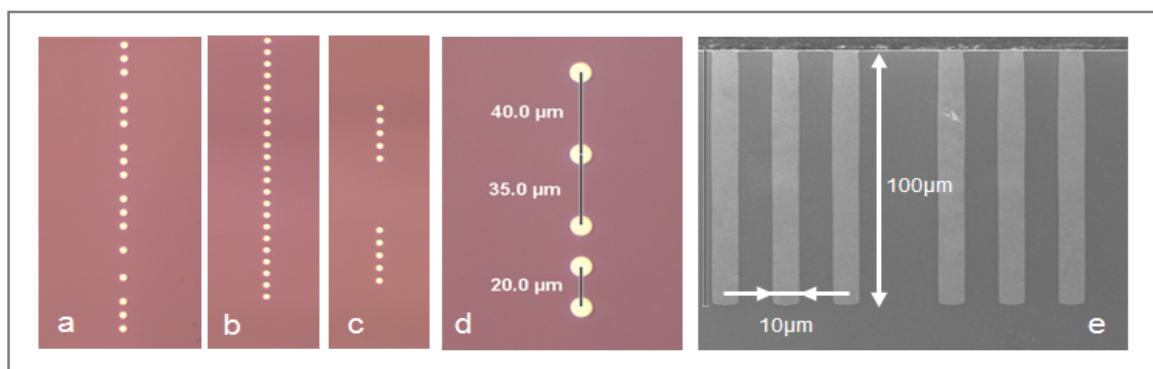


Abbildung 3-1 Übersicht des TSV-Test-Layoutes und TSV- Querschnittsaufnahme Lichtmikroskopaufnahmen a-c zeigen die in Linien angeordneten TSVs bei einer Vergrößerung von x20. Im Bild d sind die verschiedenen Pitches der TSVs bei einer Vergrößerung von x50 dargestellt. Die Querschnittsaufnahme im Bild e ist eine Scanning Electron Microscope (SEM)-Aufnahme einer TSV-Anordnung. Es handelt sich hierbei um ein TSV-Test-Layout, bei dem die TSVs ($100\mu\text{m}$ Höhe) nicht über den gesamten Querschnitt des Wafers ($780\mu\text{m}$ Dicke) gefertigt sind.

¹ scribeline – Als scribeline wird die freie Fläche zwischen zwei Dies bezeichnet. Sie wird beim Vereinzeln der Dies als Sägefläche genutzt. In der scribeline können sich Test-Strukturen befinden.

² Pitch – Der Pitch ist der Mitte-Mitte-Abstand zweier benachbarter Strukturen (z.B. TSVs).

³ CMP – chemical mechanical polish (chemisch-mechanisches-Polieren)

Prozessablauf

Als Ausgangspunkt für die Herstellung dieser TSV-Proben dient ein (001) orientierter, monokristalliner Siliziumwafer (1), welcher mit einer 60nm dicken Siliziumnitridschicht (2) beschichtet wurde. Anschließend erfolgte eine Abscheidung von 500nm Siliziumoxid (3). Für die Strukturierung der TSVs wird nach der Oxidabscheidung ein Fotoresist aufgetragen, belichtet und entwickelt (4-5). Die vertikale Strukturierung erfolgt über den Einsatz der Methode des reaktiven Tiefenionenätzens¹ (6-9). Dies ermöglicht die Umsetzung eines hohen Aspektverhältnisses und einer hohen Flankensteilheit von bis zu 90° [38]. Nach der Strukturierung wird der restliche Fotoresist entfernt (10). Anschließend erfolgt eine weitere Abscheidung von Siliziumoxid, das als elektrische Isolationschicht zwischen Silizium und dem Kupfer des TSV fungiert (11). Um die Diffusion von Kupfer in das Siliziumoxid / Silizium zu verhindern, wird zusätzlich eine Titan-Barriereschicht abgeschieden (12). Nach der Titanabscheidung erfolgt die Abscheidung einer Kupfersaatschicht (13), die als Grundlage für die spätere elektrochemische Füllung mit Kupfer genutzt wird (14). Abschließend werden beide abgeschiedenen Kupferschichten und die Barriereschicht mittels CMP und der Siliziumoxidschicht als Stoppschicht entfernt (15).

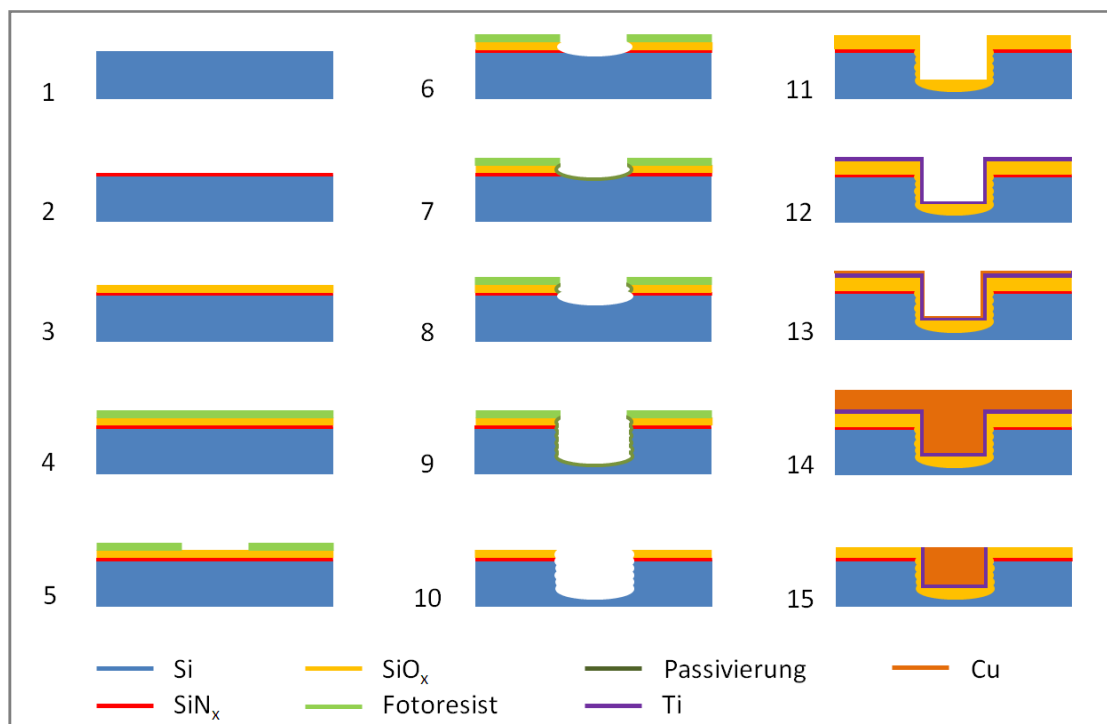


Abbildung 3-2 Prozessablauf der TSV-Proben-Herstellung

¹ DRIE – Deep Reactive Ion Etching (reaktives Tiefenionenätzen)

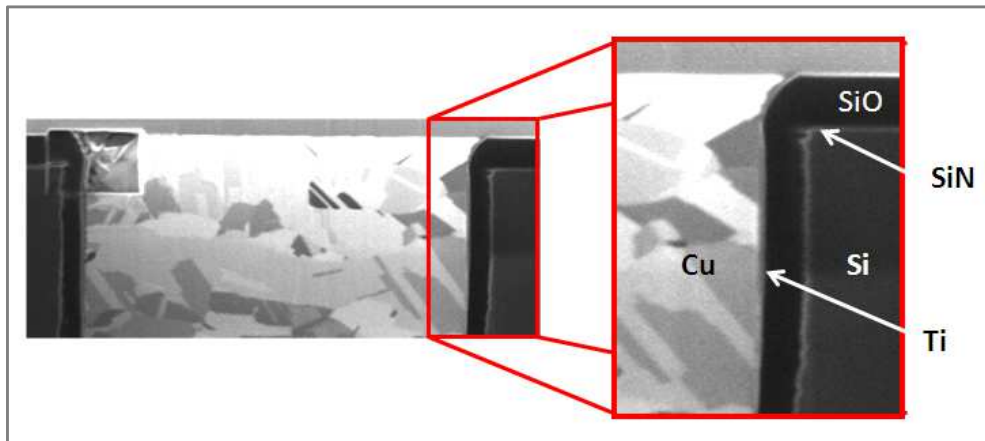


Abbildung 3-3 SEM-Querschnittsbild eines vollprozessierten TSV

3.2 Raman-Spektroskop

Für die in Kapitel 4 beschriebenen Messungen wird das HR 800 Raman-Spektroskop der Firma Jobin Yvon (Abbildung 3-4) verwendet. Es wird mit einem HeNe-Laser ($\lambda=633\text{nm}$) oder einem Ar-Ionen-Laser ($\lambda=442\text{nm}$ bzw. 488nm) betrieben. Durch das eingebaute konfokale Mikroskop von Zeiss ist es möglich, ein orts- und tiefenabhängiges Messsignal im Submikrometerbereich zu detektieren. Das Mikroskop ist mit drei verschiedenen Objektiven, die Vergrößerungen von $\times 10$, $\times 50$ und $\times 100$ ermöglichen, ausgerüstet. Für die Raman-Untersuchungen wird grundsätzlich das $\times 100$ Objektiv ($\text{NA}=0.9$) verwendet, um eine möglichst kleine Fokusbreite zu erreichen. Die Positionierung der Probe erfolgt über einen Mikrometertisch, der in x - und y -Richtung einen minimalen Verfahrweg von $0,1\mu\text{m}$ ermöglicht.



Abbildung 3-4 Versuchsplatz μ -Raman-Spektroskop

Messprinzip

Das im Laser erzeugte monochromatische Licht einer bestimmten Wellenlänge λ wird über einen Lichtwellenleiter in das Raman-Spektroskop eingeleitet (Abbildung 3-5). Durch den eingebauten Interferenzfilter (IF) werden die für die Messung nicht benötigten Plasmlinien unterdrückt. Über ein Filterrad, mit welchem unterschiedliche Filter eingestellt werden können, kann die auf die Probe eingestrahlte Energie variiert werden. Über ein Spiegelsystem wird der Laserstrahl auf den Edge-Filter gelenkt, wo er reflektiert wird. Anschließend wird der Strahl durch das Mikroskopobjektiv auf der Probe fokussiert. Das von der Probe gestreute Licht gelangt über das Objektiv zum Strahlteiler. Von dort wird das Licht entweder auf eine angeschlossene Videokamera oder zum Spektroskop reflektiert. Der Edge- bzw. Notchfilter unterdrückt dabei die Wellenlängen des elastisch gestreuten Lichtes. Das gefilterte Licht wird anschließend am optischen Gitter in einzelne Wellenlängen aufgespalten und durch das CCD-Feld in ein elektrisches Signal umgewandelt. Dieses wird dann über eine Hard- und Software am PC ausgewertet.

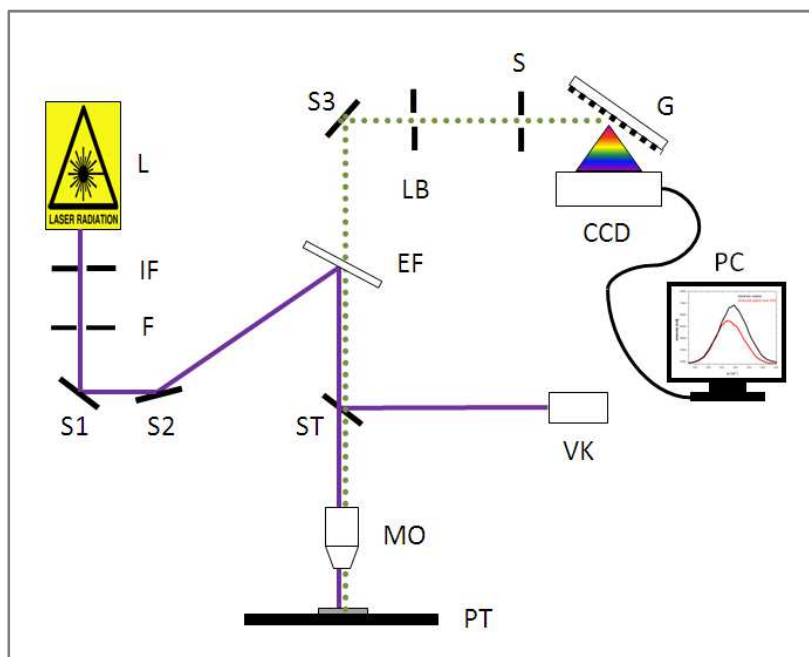


Abbildung 3-5 Strahlengang des μ -Raman-Spektroskops

CCD – CCD Detektor
EF – Edge Filter
F – Filter
G – optisches Gitter

IF – Infrarot Filter
L – Laser
LB – Lochblende
MO – Mikroskopobjektiv

PT – Proben Tisch
S – Spalt
S1/2/3 – Spiegel
ST – Strahlteiler

3.3 4-Punkt-Biege-Tester

Für Raman-Messungen, bei denen eine Probe mechanisch verspannt wird, ist eine spezielle Halterung notwendig. Dabei wird ein 50mmx3.5mm großes Probenstück in eine aus Aluminium gefertigte Halterung (Abbildung 3-6) gespannt. Aufgrund der geringen Höhe von ca. 0,5cm ist es möglich, den 4-Punkt-Biege-Tester unterhalb des Raman-Mikroskopes zu platzieren. Mit Hilfe einer Madenschraube kann das Alu-Plättchen in der Mitte der Halterung verschiedene Werte in z-Richtung annehmen und somit die Probe verspannen. Dabei werden die äußeren Kanten des Grundkörpers als äußere Auflagekanten (äußere Pins) verwendet. Durch die Höhenverstellung des Aluminiumplättchens wird über dessen Kanten eine Kraft auf den Probenstreifen übertragen. Die Folge ist eine elastische Verbiegung der Probe, wodurch im Bereich der inneren Pins ein homogenes Spannungsfeld in x und y-Richtung erzeugt wird. In z-Richtung kann aufgrund der gestreckten Kristallstruktur eine Zugspannung auf der Oberseite gemessen werden. Auf der Unterseite ist durch die Stauchung der Kristallstruktur eine Druckspannung zu erwarten. Der Übergang der beiden Spannungsbereiche erfolgt in einer neutralen Faser, welche in der Mitte des Probenquerschnitts liegt (Abbildung 3-7).

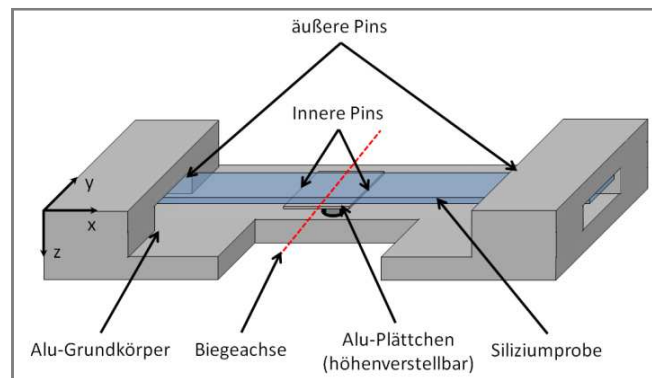


Abbildung 3-6 Schematischer Aufbau des 4-Punkt-Biege-Testers

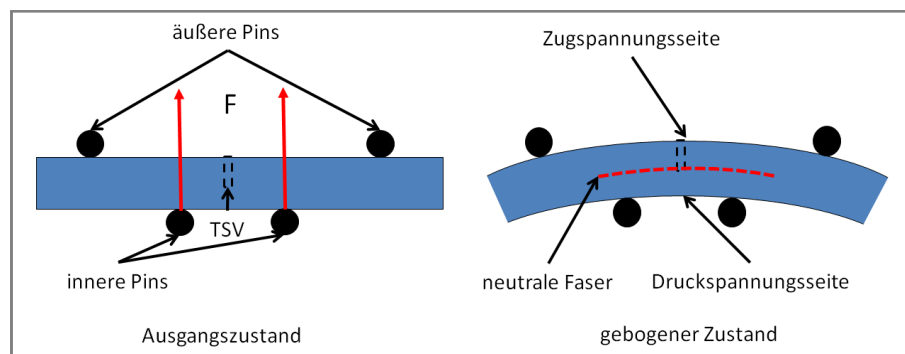


Abbildung 3-7 Zustände der 4-Punkt-Biege-Methode

4. Spannungsuntersuchungen an TSV-Strukturen

Dieses Kapitel beschreibt alle Untersuchungen, die für die Analyse des Spannungsverhaltens im Silizium in der Nähe von TSV-Strukturen durchgeführt wurden. Der erste Abschnitt befasst sich mit den unterschiedlichen oberflächennahen Spannungsquellen in einer Tiefe von ~250nm. Diese Untersuchungen erfolgten mittels sogenannten top-down- Messungen. Der zweite Abschnitt enthält Messungen, die auf TSV-Querschnittspräparationen durchgeführt werden. Diese sind notwendig um das Spannungsverhalten über den gesamten Querschnitt des TSVs zu ermitteln. Eine Analyse der Tiefenabhängigkeit im oberflächennahen Bereich erfolgt im dritten Abschnitt durch die Variation der Laser-Wellenlänge.

4.1 Allgemeines

4.1.1 Messungen

Für eine vergleichende Auswertung der Spannungszustände ist es wichtig, die Messungen bei gleichen Einstellungen durchzuführen. Die Spektroskop-Software LabRam bietet verschiedene Möglichkeiten der Parametereinstellung für z.B. Filter, optisches Gitter, Messzeit oder Schrittweite. Die wichtigsten Werte der Messparameter sind in Tabelle 4-1 dargestellt.

Tabelle 4-1 Verwendete Parameter für die experimentellen Untersuchungen

| Parameter | Einheit | $\lambda_1=633\text{nm}$ | $\lambda_{2,3}=442/488\text{nm}$ |
|------------------------------|---------------|--------------------------|----------------------------------|
| Optisches Gitter | Spalten/mm | 1800 | 3600 |
| Spaltblende | μm | 100 | 100 |
| Lochblende | μm | 1000 | 1000 |
| Messzeit | Sekunden | 1-5 | 1-5 |
| Wiederholungen pro Messpunkt | | 2 | 2 |
| Schrittweite | μm | 0,1-0,7 | 0,1-0,7 |
| Filter | | keiner | D0.6 bzw. keiner |

4.1.2 Auswertung

Die erzeugten Messdaten werden in einem Text-Dateiformat gespeichert und anschließend in Origin¹ importiert und ausgewertet. Zunächst erfolgt die Auswertung der Peak-Position der Einzelspektren über eine mathematische Beschreibung des Spektrums (Lorentzfunktion). Die ermittelte Funktion fungiert als Hilfsfunktion, um die Wellenzahl der maximalen Intensität zu bestimmen. Anschließend erfolgt mithilfe eines Referenzwertes für unverspanntes Silizium die Spannungsberechnung nach Gleichung (2-31). Für die Datenanalyse stehen folglich drei unterschiedliche Werte für jedes Spektrum zur Verfügung: Intensität, Wellenzahl und errechneter Spannungswert zu einem Silizium-Referenzwert. Diese Messdaten können grafisch ausgegeben werden. In Abbildung 4-1 sind exemplarisch alle Komponenten einer Raman-Messung an einer Kupfer-Pad-Struktur, welche auch für die Untersuchung des Laserprofils genutzt wurde, grafisch dargestellt. Negative Spannungswerte sind Druckspannungen und positive Zugspannungen.

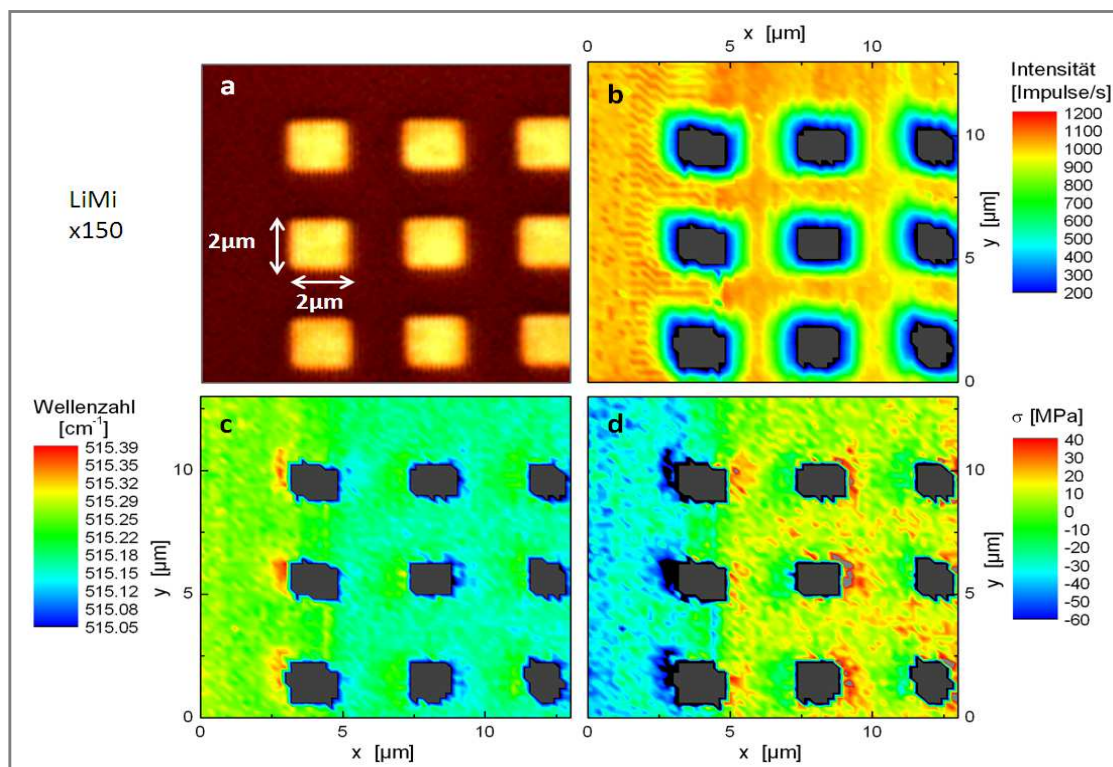


Abbildung 4-1 μ-Raman-Map an Cu-Pads Bild a ist eine Lichtmikroskopaufnahme der $2\mu\text{m} \times 2\mu\text{m}$ großen Kupfer-Pad-Strukturen bei 150-facher Vergrößerung. In Bild b kann man den Intensitätsverlauf der μ -Raman-Messung erkennen. Die messbare Intensität auf den Pads beträgt Null, da kein Si-Signal gemessen wird. Die gefitteten Peak-Wellenzahlen sind in Bild c aufgetragen. Nach der Spannungsberechnung über Gleichung (2-31) ergibt sich aus der Wellenzahlverschiebung die Darstellung d.

¹ Origin – Software für Datenanalyse und –visualisierung (<http://www.originlab.com>)

4.2 Oberflächennahe Untersuchungen

Eine Teilaufgabe dieser Bachelorarbeit besteht in der Untersuchung von oberflächennahen Spannungszuständen an TSV-Strukturen. Oberflächennahe Untersuchungen sind Messungen, die top-down¹ und bis zu einer Tiefe von ca. 250nm im Silizium durchgeführt werden (Abbildung 4-2).

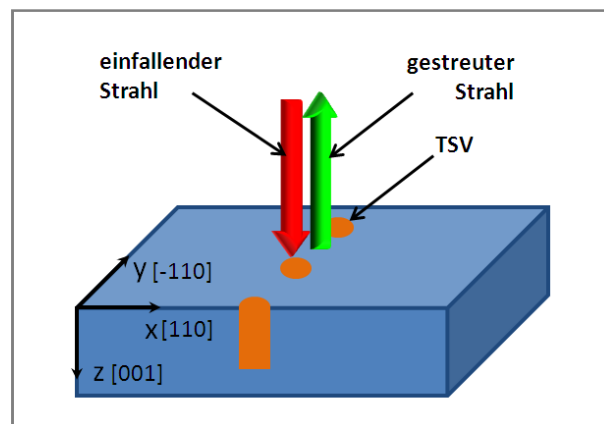


Abbildung 4-2 Übersicht top-down Messung

Ausgangsmessung

Ausgehend von der Annahme, dass TSVs den Spannungszustand im Silizium beeinflussen, werden Messungen an zwei unterschiedlichen Proben durchgeführt. Probenserie A enthält voll prozessierte TSVs. Die Probenserie G (ungefüllte TSVs) ist bis einschließlich Prozessschritt 10 (Kapitel 3.1) prozessiert. Es werden Linienmessungen über fünf gruppierte TSVs mit einem Pitch von 20µm durchgeführt. Die Schrittweite ist auf 0,1µm festgelegt. Die Eindringtiefe der Photonen in das Silizium beträgt, aufgrund der Anregungswellenlänge von 442nm, ca. 250nm (Kapitel 2.2.5). Aus der Peak-Verschiebung zwischen unverspanntem und verspanntem Silizium lässt sich mit Gleichung (2-31) der Spannungsverlauf für die beiden Proben bestimmen. Es zeigt sich, dass Zugspannungen in der Nähe der TSVs vorhanden sind. Diese weisen einen Maximalwert von ca. 175MPa auf (Abbildung 4-3). Die Spannungen klingen mit zunehmender Entfernung vom TSV ab. Zwischen zwei TSVs kommt es zu einer Überlagerung der Spannung, da die Abklingreichweite der Spannungen größer ist als der Abstand der TSVs.

¹ Top down – „von oben nach unten“. In diesem Fall handelt es sich um eine Bezeichnung für eine Ausrichtung der Probe bei der Messung. Die Probe wird dafür nach Abbildung 4-2 unterhalb des Mikroskops platziert.

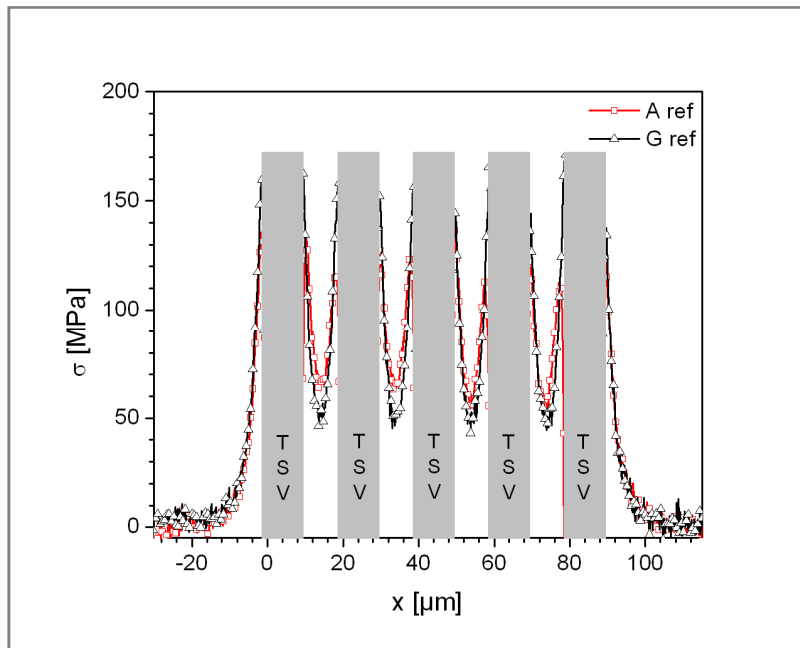


Abbildung 4-3 Vergleich der Spannungsprofile der Probenserien A und G Bei beiden Proben wird ein Linienscan über eine Gruppe von 5 TSVs (grau) durchgeführt. Die rote Kurve (Viereck) zeigt den Spannungszustand der gefüllten TSVs (Probenserie A). Der Spannungszustand der ungefüllten TSVs (Probenserie G) ist durch die schwarze Kurve (Dreiecke) dargestellt. Beide Messungen erfolgen mit einer Anregungswellenlänge von 442nm.

Im Vergleich der beiden Proben wird deutlich, dass schon vor dem TSV-Füllprozess Spannungen vorhanden sind und diese durch die Kupferabscheidung nur geringfügig geändert werden. Ausgehend von diesen Messungen wurden die weiteren Untersuchung der Spannungsverläufe in folgende Teilbereiche untergliedert:

- (1) Dielektrische Schichten
- (2) Kupferabscheidung
- (3) Einfluss einer Temperaturbehandlung
- (4) Layout-Effekte.

Die Punkte 1-3 werden im weiteren Verlauf, ausgehend von den experimentellen Untersuchungen, diskutiert. Die Untersuchung von Layout-Effekten ist an den vorliegenden Proben nur bedingt durchführbar, da nur eine linienförmige TSV-Anordnung in der Teststruktur existiert. Aus diesem Grund wird an dieser Stelle auf die Quellen [39,40] verwiesen, in der z.B. der Einfluss des TSV-Durchmessers auf den Spannungszustand untersucht wurde. In beiden Arbeiten wird von einer positiven Auswirkung auf den Maximalstress, durch eine Reduktion des TSV-Durchmessers bei konstantem Pitch, berichtet. Dies wird damit begründet, dass bei einem kleineren Durchmesser sich die Deformation des Siliziums über ein größeres Gebiet ausbreiten kann.

4.2.1 Einfluss dielektrischer Schichten

Die dielektrischen Schichten bestehen in den vorliegenden Proben aus einer Siliziumnitrid (SiN_x)- und einer Siliziumoxidschicht. Das Siliziumoxid (SiO_x) wird als Isolator zwischen Kupfer und Silizium eingesetzt. Durch den Einsatz einer Siliziumnitridschicht wird der prinzipielle SOI-Schichtaufbau nachempfunden. Der Einfluss der dielektrischen Schichten auf den Spannungszustand wird an den ungefüllten TSVs untersucht. Um unabhängige Aussagen zum Spannungsverhalten der einzelnen dielektrischen Schichten zu treffen, wird der Einfluss der Siliziumnitrid- sowie der Siliziumoxidschicht jeweils getrennt untersucht. Dafür werden die Proben mittels Fluorwasserstoffsäure schrittweise zurückprozessiert. Nach dem Ätzprozess erfolgt eine Überprüfung der Schichtdicke mittels VASE (Variable Angle Spectroscopic Ellipsometry).

Linienmessungen

Die Untersuchung des Siliziumoxidanteils am Spannungsverlauf erfolgt durch den Vergleich zwischen einer Probe mit vollständigem dielektrischen Aufbau und einer Probe mit einer 60nm dicken Siliziumnitridschicht ohne Oxid. Um Spannungsüberlagerungen von benachbarten TSVs auszuschließen, werden die Linienmessungen in vertikaler Richtung zu den TSV-Linienstrukturen durchgeführt. Die Ergebnisse dieses Experimentes sind in Abbildung 4-4 dargestellt. Beide Proben weisen Zugspannungen auf, die mit wachsender Entfernung zur TSV-Kante sinken. Der Maximalwert kann jeweils an der Kante gemessen werden und liegt zwischen 180 und 200MPa. In einer Entfernung von 15 μm klingen die Spannungen bei beiden Proben vollständig ab. Die Probe mit vollständigem dielektrischen Schichtaufbau weist eine geringfügig höhere Spannung im Vergleich zur zweiten Probe auf. Wird der Anteil dieser Spannungsänderung an der Gesamtspannung betrachtet, so lässt sich feststellen, dass das SiO_x im Vergleich zum SiN_x nur einen geringen Anteil am Spannungsverhalten der dielektrischen Schichten besitzt. Folgende Gründe werden dafür in Betracht gezogen:

1. Die SiO_x -Schicht ist durch den Herstellungsprozess nur intrinsisch leicht druckverspannt.
2. Die SiN_x -Schicht fungiert als Puffer und überträgt die Spannungen der SiO_x -Schicht nur schwach auf das Silizium.
3. Die SiN_x -Schicht ist an der TSV-Kante durch den nasschemischen Ätzprozess, welche für die Entfernung der Oxidschicht eingesetzt wird, seitlich unterätzt.

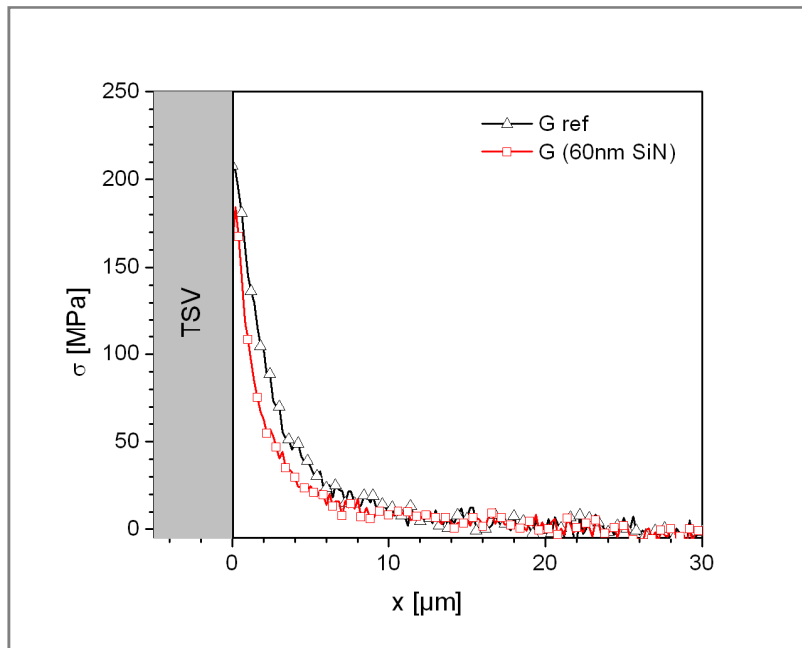


Abbildung 4-4 Einfluss von SiO_x auf den Spannungszustand Die rote Kurve (Vierecke) zeigt den Spannungszustand bei vollständigem dielektrischem Schichtaufbau in der Nähe eines einzelnen TSVs (grau). Die schwarze Kurve (Dreiecke) stellt den Spannungsverlauf nach einer vollständigen SiO_x -Entfernung dar. Beide Messungen erfolgen mit einer Anregungswellenlänge von 442nm.

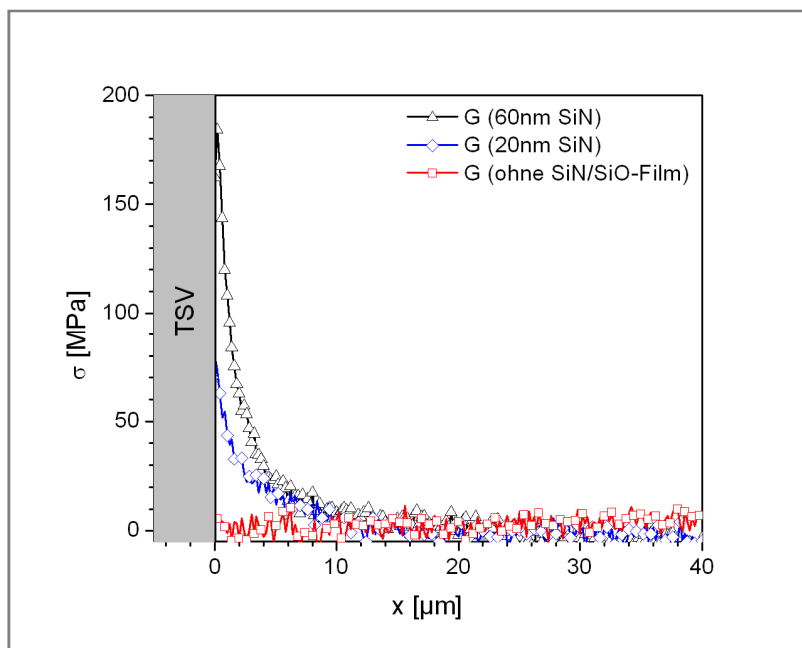


Abbildung 4-5 Einfluss der SiN_x -Schichtdicke auf den Spannungszustand Die Untersuchung der Auswirkung der Filmdicke auf den Spannungszustand wird an 3 Proben mit unterschiedlichen Dicken durchgeführt. Die schwarze Kurve (Dreiecke) zeigt ein Spannungsprofil bei einer Filmdicke von 60nm. Nach einem weiteren Ätzprozess ergibt sich für eine Schichtdicke von 20nm ein Spannungsprofil, welches durch die blaue Kurve (gedrehte Vierecke) dargestellt ist. Nach vollständiger Entfernung der Nitridschicht ergibt sich die rote Messkurve (Vierecke). Alle Messungen erfolgen mit einer Anregungswellenlänge von 442nm.

Ein weiterer Schritt für die Untersuchung der Siliziumnitridspannungen ist die sukzessive Entfernung der SiN-Schicht. Hierfür stehen drei Proben mit unterschiedlicher Filmdicke zur Verfügung. Die erste Probe besteht aus einer 60nm dicken SiN_x-Schicht auf dem Siliziumsubstrat. Auf der zweiten Probe beträgt die Schichtdicke 20nm. Bei der dritten Probe ist der Schichtaufbau vollständig entfernt. Es zeigt sich, dass eine Reduzierung der SiN_x-Schichtdicke einen entscheidenden Einfluss auf den Spannungsverlauf hat (Abbildung 4-5). Wird die Schichtdicke um 2/3 reduziert, sinkt der Maximalwert der Spannung an der TSV-Kante von ca. 200MPa auf 65MPa. Dies entspricht einer Spannungsreduktion um 2/3. Somit ist die Spannung, welche durch den Siliziumnitridfilm im Silizium erzeugt wird, direkt proportional zur Filmdicke. Nach der kompletten Entfernung der SiN_x-Schicht ist die Spannung im Rahmen des Messfehlers Null.

Flächenmessungen

Scans in x und y Richtung deuten darauf hin, dass sich das Spannungsfeld isotrop zum TSV verhält. Um abschließend einen Überblick über das gesamte Spannungsfeld zu erlangen, wird eine 2D-Map erstellt. Diese Flächenmessung setzt sich aus mehreren einzelnen x-Linienscans zusammen und wird aus Gründen der Messzeit mit einer vergrößerten Schrittweite von 0,7μm in x und y-Richtung gemessen. Der in Abbildung 4-6 dargestellte Spannungsverlauf bestätigt die Annahme eines isotropen Spannungszustandes. Die gestrichelte Kurve deutet den Überlagerungseffekt der Spannungen durch ein benachbartes TSV an.

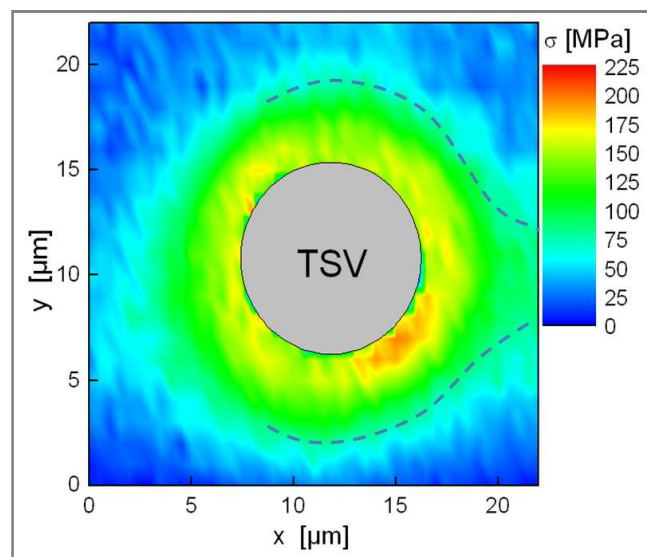


Abbildung 4-6 2D-Spannungsverlauf an einem einzelnen ungefüllten TSV Die Map zeigt eine Zugspannung von ca. 200MPa in der Nähe der TSV-Kante, welche in einer Entfernung von ca. 10μm abklingt. Rechts von dem gemessenen TSV befindet sich ein weiteres TSV. Die Messung erfolgt bei einer Anregungswellenlänge von 442nm.

Das Siliziumnitrid erzeugt die Spannung im Silizium aufgrund seiner eigenen intrinsischen Verspannung. Diese kann durch Prozessparameter bei der Abscheidung beeinflusst werden. Typische Spannungswerte für SiN-Schichten liegen je nach Abscheidungsverfahren zwischen -1,1 und 1,2 GPa [7]. Die im Silizium erzeugten Spannungen können mit Modellen von Hu et al. [29] grundlegend beschrieben werden.

4.2.2 Einfluss der Kupferabscheidung

In Abbildung 4-3 wird deutlich, dass sich der Spannungsverlauf durch die Kupferabscheidung geringfügig ändert bzw. durch den hohen Anteil der Nitridspannung überlagert wird. Die Kupferabscheidung erfolgt elektrochemisch, d.h. es wird eine Spannung zwischen der Kupfersaatschicht, die als Kathode fungiert, und einer Opferanode angelegt. Beide Pole sind über ein elektrolytisches Bad verbunden. Nach der Abscheidung erfolgt ein kurzer Temperschritt von 250°C für 5 Minuten. Bei dem anschließenden Abkühlprozess kann es aufgrund eines unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten zu Spannungen im Silizium kommen. Diese werden im Folgenden genauer betrachtet und als „Kupferspannungen“ bezeichnet.

Die Untersuchung erfolgt anhand eines Vergleiches von gefüllten und ungefüllten TSVs. Es werden Linienscans senkrecht zu den TSV-Linienstrukturen durchgeführt, um Überlagerungseffekte auszuschließen. Die Schrittweite zwischen zwei Messpunkten wird auf 0,1µm festgelegt. Die Ergebnisse dieser Messreihe sind in Abbildung 4-7 dargestellt.

Es zeigt sich wie in Kapitel 4.2.1 der bereits diskutierte tensile Spannungscharakter an den nicht gefüllten TSVs. Im Vergleich zwischen der Probenserie A und G ist nahezu kein Unterschied erkennbar. Lediglich zwischen $x=0\mu\text{m}$ und $x=1\mu\text{m}$ existiert eine geringe Differenz. Folglich ist der Einfluss der Kupferabscheidung auf den Spannungsverlauf sehr gering.

Um den Einfluss der Kupferspannungen genauer zu untersuchen, wird der dielektrische Schichtaufbau mittels CMP entfernt. Diese Methode wird einer nasschemischen Entfernung vorgezogen, da bei der chemischen Entfernung auch der Oxidliner, der das TSV umgibt, angegriffen wird. Dies hat zur Folge, dass der Kontakt zwischen Kupfer und Silizium im oberflächennahen Bereich nicht mehr gegeben ist und somit keine Spannungen übertragen werden.

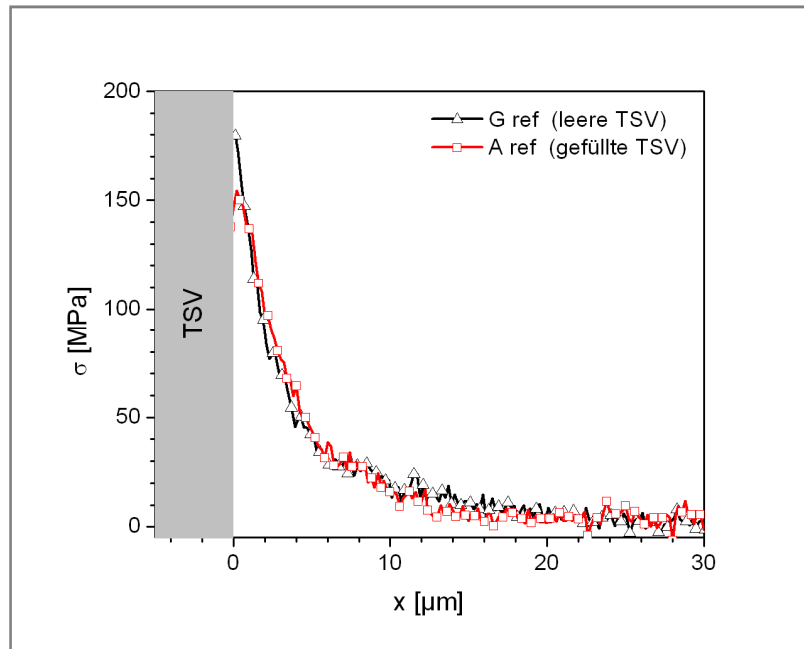


Abbildung 4-7 Einfluss der Kupferabscheidung auf das Spannungsverhalten Die rote Kurve (Vierecke) zeigt das Spannungsverhalten an einem gefüllten TSV der Probenserie A. Der Maximalwert ist ca. 40MPa kleiner bei der Vergleichsmessung an einem ungefüllten TSV der Probenserie G (schwarze Dreiecke). Beide Messungen erfolgen bei einer Anregungswellenlänge von 442nm.

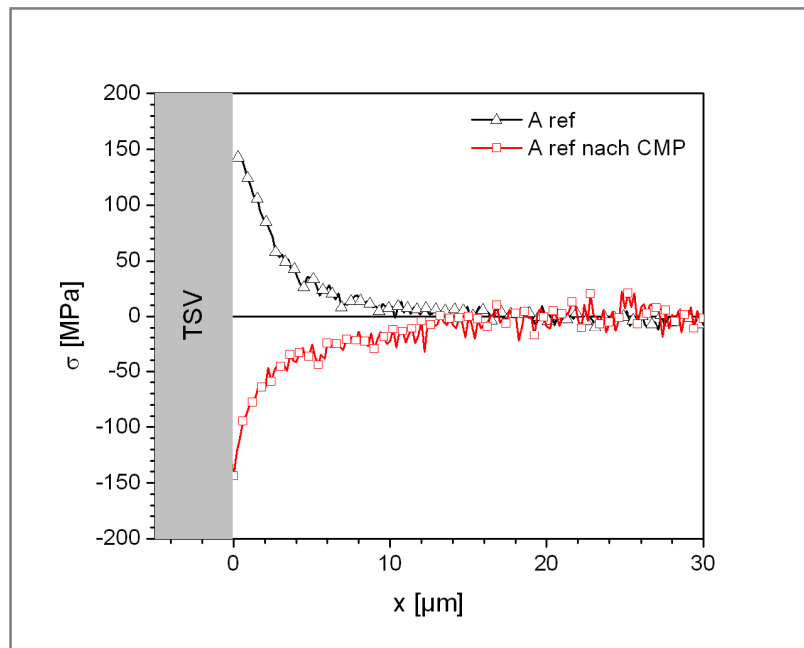


Abbildung 4-8 Spannungen im Si vor und nach CMP der dielektrischen Schichten In der Abbildung sind zwei Spannungsprofile vor (schwarze Dreiecke) und nach (rote Vierecke) der Entfernung der dielektrischen Deckschichten mittels CMP dargestellt. Beide Messungen erfolgen bei einer Anregungswellenlänge von 442nm.

Die Ergebnisse dieser Untersuchung, mit einer Schrittweite von $0,1\mu\text{m}$, sind in Abbildung 4-8 dargestellt. Vor der Entfernung der dielektrischen Schichten ist eine Zugspannung erkennbar, die mit steigender Entfernung abklingt. Die polierte Probe weist ein völlig anderes Spannungsprofil auf. Es ist ein kompressiver Spannungsverlauf, mit einem Maximum von -150MPa an der TSV-Kante festzustellen. Mit wachsender Entfernung zur TSV-Kante klingt die Druckspannung ab. Beim Vergleich der Messungen aus Abbildung 4-7 und Abbildung 4-8 ergibt sich ein Widerspruch. Vor dem CMP-Prozess zur Entfernung der dielektrischen Schichten beträgt der Spannungsunterschied zwischen Probenserie A und G Null. Die Messungen an der polierten Probe zeigen dagegen, dass durch das Kupfer ein Spannungswert von -150MPa erzeugt wird.

Für den Unterschied dieser Werte gibt es zwei mögliche Ursachen:

1. zusätzliche Spannungen durch das Polieren
2. geänderte Geometrie der Oberfläche (Abbildung 4-9)

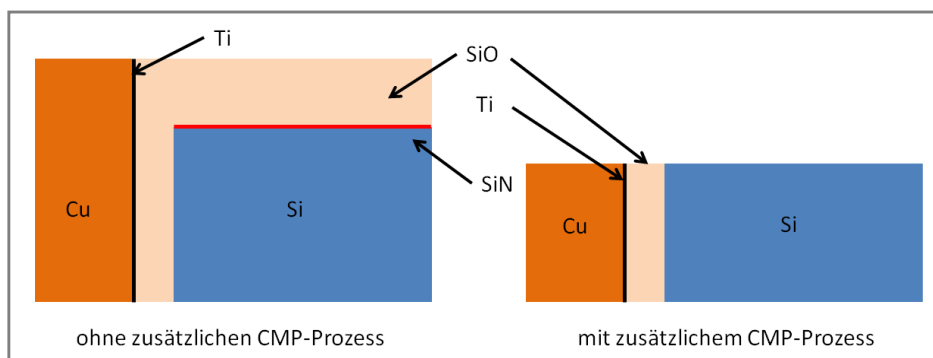


Abbildung 4-9 Oberflächennaher Schichtaufbau vor und nach CMP

Aufgrund von reproduzierbaren Messungen an unterschiedlichen TSV-Gruppen mit vergleichbarem Messresultat wird der Einfluss von Polierspannungen, die als zufällig verteilt angenommen werden, ausgeschlossen. Die Erklärung, dass durch eine Änderung der Oberflächengeometrie die Spannung, welche durch das Kupfer im Silizium erzeugt wird, ist wahrscheinlicher.

Unabhängig von den unterschiedlichen Resultaten aus beiden Experimenten lässt sich die erzeugte Spannung auf einen unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Kupfer ($15,6 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$) und Silizium ($3,6 \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$) zurückführen [41]. Dieser Ansatz wurde in einigen wissenschaftlichen Arbeiten bereits analytisch untersucht [42]. Eine weitere Untersuchung der Kupferspannungen erfolgt in Kapitel 4.3.2 über eine

Variation der Wellenlänge des einstrahlenden Laserlichtes bzw. im folgenden Kapitel 4.2.3.

4.2.3 Einfluss einer Temperung

Die Temperaturgrenze für BEoL-Prozesse liegt bei ca. 350-420°C. Diese Prozesse folgen nach der TSV-Strukturierung um die elektrischen Verbindungen zu realisieren. Die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Kupfer und Silizium lassen vermuten, dass sich bei einer Temperung der Proben mit höheren Temperaturen ($250^{\circ}\text{C} < T < 380^{\circ}\text{C}$) und längeren Zeiten (> 5 Minuten) der Spannungszustand weiterhin ändern wird. Die folgenden Untersuchungen befassen sich aus diesem Grund mit der Untersuchung von Temperatureinflüssen auf den Spannungszustand an TSV-Strukturen.

Bei den Untersuchungen wird der Einfluss der Temperatur auf die dielektrischen Schichten und auf das Kupfer getrennt betrachtet. Die Messungen erfolgen an derselben Probe, um Unterschiede zwischen einzelnen Probensätzen auszuschließen. Der Einfluss einer Temperung auf die dielektrischen Schichten wird deshalb an einer TSV-Kante an einer der vier Probenkanten untersucht. Es existieren vier verschiedene Probensätze, bei denen jeweils eine unterschiedliche Temperatur bzw. Zeit für die Temperung gewählt wurde (Tabelle 4-2).

Tabelle 4-2 Probenübersicht für die Untersuchung des Temperatureinflusses

| Probenname | Temperatur | Zeit |
|------------|------------|-----------|
| A ref | 250°C | 5 Minuten |
| A 250 | 250°C | 1 Stunde |
| A 300 | 300°C | 1 Stunde |
| A 380 | 380°C | 1 Stunde |

Die Resultate der Messreihe, bei der eine Schrittweite von 0,1µm verwendet wurde, sind in Abbildung 4-10 dargestellt. Aufgrund der linearen Kantengeometrie im Vergleich zu der Kantengeometrie eines kreisrunden TSVs sind die absoluten Spannungswerte um ca. 50MPa höher als bei den in Kapitel 4.2.2. beschriebenen Messungen.

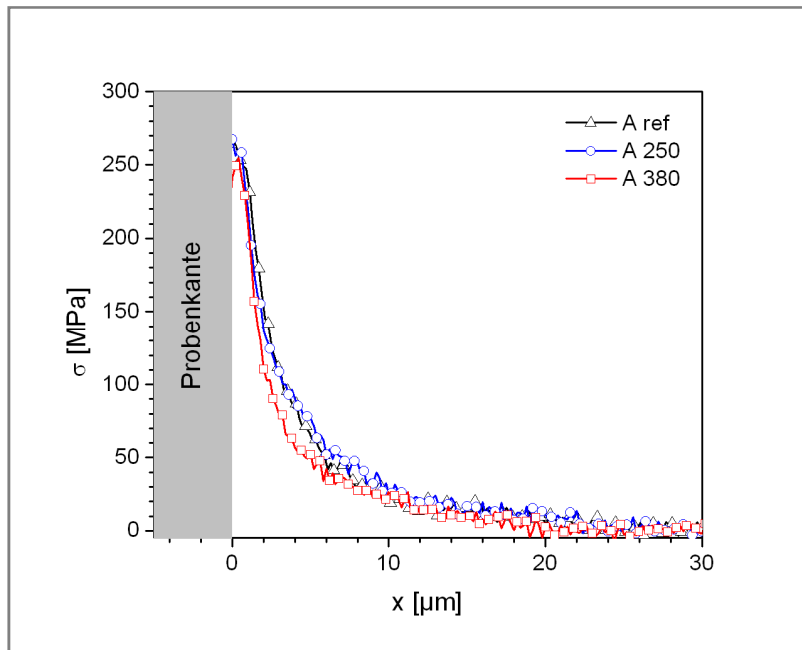


Abbildung 4-10 Einfluss einer Temperatur auf den Spannungszustand 1 Die Messungen erfolgten an Probenkanten der Probenserie A (gefüllte TSVs), welche bei unterschiedlichen Temperaturen getempert wurden. Die schwarze Kurve (Dreiecke) wurde an der Referenzprobe aufgenommen. Die blaue Kurve (gedrehtes Viereck) und die rote Kurve (Viereck) spiegeln Messungen an der mit 250°C bzw. 380°C getemperten Probe wieder.

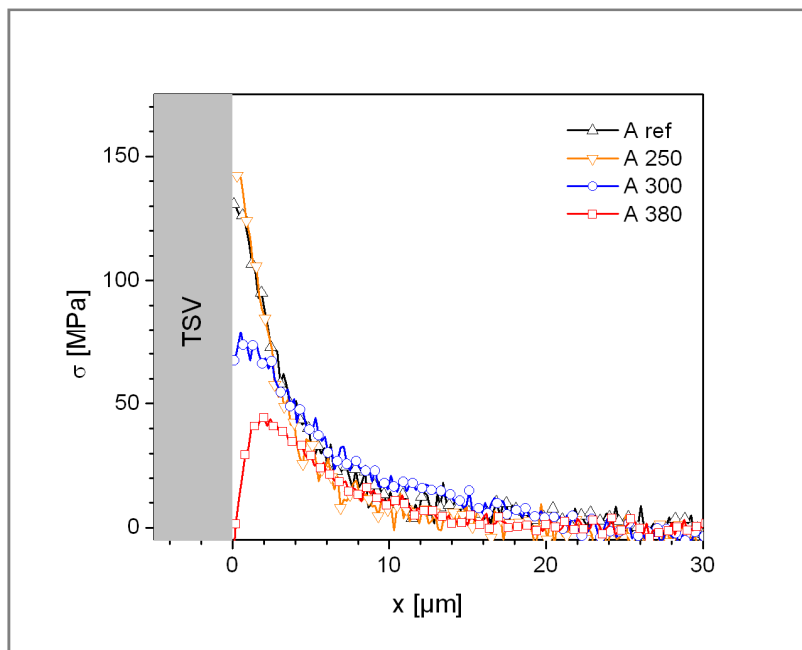


Abbildung 4-11 Einfluss einer Temperatur auf den Spannungszustand 2 Die Messungen erfolgten an einer TSV-Kante der Probenserie A (gefüllte TSVs), welche bei unterschiedlichen Temperaturen getempert wurden. Die schwarze Kurve (Dreiecke mit Spitze nach oben) wurde an der Referenzprobe aufgenommen. Die orange Kurve (Dreiecke mit Spitze nach unten), die blaue Kurve (gedrehtes Viereck) und die rote Kurve (Viereck) spiegeln Messungen an den mit 250°C, 300°C und 380°C getemperten Proben wieder.

Wird der Einfluss der unterschiedlichen Temperaturen beim Temperungsprozess betrachtet, wird deutlich, dass kein signifikanter Unterschied bei den Proben G existiert (Abbildung 4-10). Der Spannungszustand, der durch die dielektrischen Schichten erzeugt wird, ist somit unabhängig von der Temperatur, die für die Temperung der Proben eingesetzt wird.

Der zweite Teil der Untersuchung befasst sich mit dem Einfluss der Temperatur auf die vom Kupfer induzierten Spannungen. Hierfür werden Messungen an TSV-Kanten durchgeführt. In Abbildung 4-11 sind die Resultate dargestellt.

Der Einfluss einer Temperung bei 250°C für eine Stunde ist im Vergleich zu den Ausgangsproben (250°C für 5 Minuten) nur gering. Wird die Temperatur jedoch erhöht, nimmt die gemessene Zugspannung in TSV-Nähe ab. Im Umkehrschluss bedeutet dies, dass der vom Kupfer erzeugte kompressive Spannungsanteil steigt. Eine Erklärung ist der Unterschied in den thermischen Ausdehnungskoeffizienten. Durch die thermische Belastung dehnt sich das Kupfer deutlich stärker aus als das Silizium und verformt sich plastisch. Diese plastische Verformung kann als Extrusion mittels AFM-Messungen nachgewiesen werden (Abbildung 4-12). Die Kupferextrusionen (Abbildung 4-13) führen zu einem geänderten Spannungseintrag im oberflächennahen Bereich und somit zu einer Änderung des Spannungsverlaufes im Silizium. Nach dem Tempereschritt kühlt das Kupfer ab und zieht sich stärker zusammen als das Silizium. Eine genauere Erklärung dieses Prozesses erfolgt in Kapitel 4.3.2 .

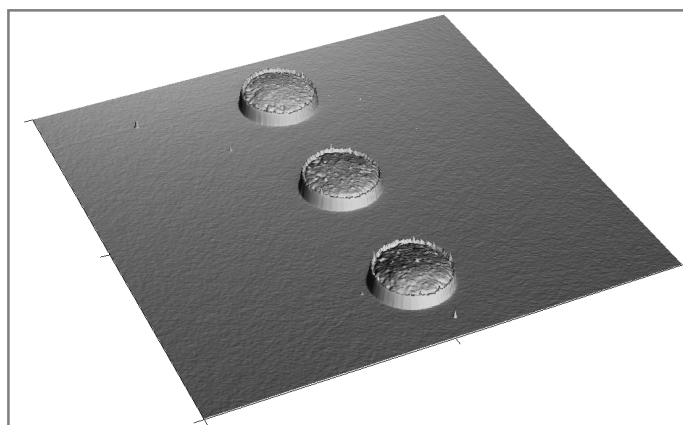


Abbildung 4-12 AFM-Aufnahme von 3 TSVs nach Temperung (380°C) ¹

¹ Die AFM-Messungen wurden im Rahmen eines internen Auftrages durch Dr. Martin Weisheit am AFM des Center for Complex Analysis (CCA) bei GLOBALFOUNDRIES durchgeführt.

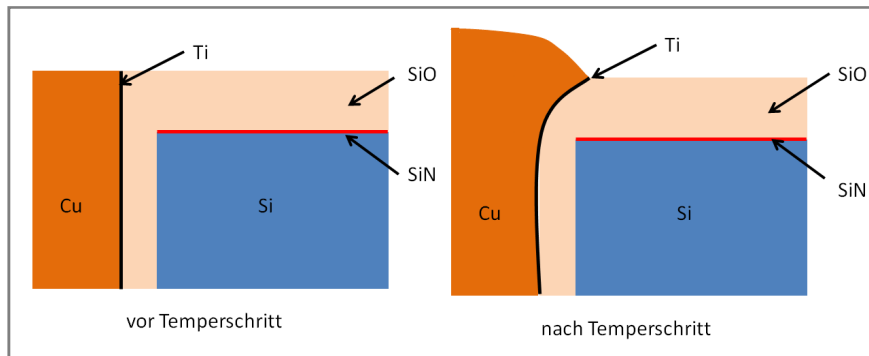


Abbildung 4-13 Vergleich der TSV-Struktur vor und nach der Temperung

4.3 Tiefenabhängigkeit der Spannungen

Für die Ermittlung des Spannungsverhaltens in z-Richtung existieren zwei Methoden. Auf der einen Seite ist eine Variation der Laserwellenlänge denkbar. Bei dieser Methode erhöht sich mit steigender Wellenlänge die Eindringtiefe (Kapitel 2.2.5). Der Vorteil in dieser Methode liegt in der zerstörungsfreien Messung. Da der Laserstrahl jedoch ein gewisses Intensitätsprofil über die gesamte Messtiefe besitzt, werden nicht nur in der Messtiefe Photonen gestreut, sondern im gesamten Volumen. Das bedeutet, dass der Messwert eine Überlagerung von Spannungen beinhaltet. Die zweite Methode ist die Präparation von TSV-Querschnitten. Bei der Präparation ist es jedoch möglich, dass ein Teil der Spannungen relaxiert bzw. Polierspannungen erzeugt werden. Es bietet sich jedoch die Möglichkeit, den Spannungszustand über den gesamten Querschnitt des TSV zu untersuchen. In den folgenden beiden Teilkapiteln 4.3.1 und 4.3.2 werden beide Methoden genutzt, um das Spannungsverhalten näher zu untersuchen.

4.3.1 TSV-Querschnittsuntersuchung

Bei den Untersuchungen auf Querschnittspräparationen ändert sich die Kristallebene in der Photonen gestreut werden. Im Vergleich zu top-down-Messungen werden die Photonen nicht mehr in der (001)-Ebene sondern von der (110) oder $(1, \bar{1}0)$ -Ebene gestreut (Abbildung 4-14). Folgt man den Auswahlregeln (Kapitel 2.2.2) zeigt sich, dass in diesen Kristallebenen und der verwendeten Polarisationssebene $(11, \bar{1}0)$ nicht nur die 3. Mode (LO-Mode) betrachtet werden kann. Um die theoretischen Annahmen zu den Spannungsberechnungen zu bestätigen, ist es notwendig beide Kristallorientierungen experimentell, in Hinsicht auf den Sensitivity-Faktor S , zu vergleichen.

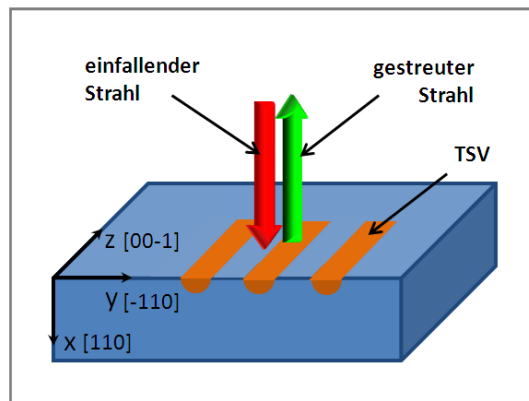


Abbildung 4-14 Darstellung Messungen auf einer Querschnittspräparation

Die Untersuchung erfolgt durch eine in-situ Kombination von 4-Punktbiege- und μ -Raman-Verfahren, bei dem ein monokristalliner Siliziumstreifen in einer 4-Punkt-Biege-Apparatur mechanisch verspannt wird. Durch die Verbiegung des Siliziumstreifens wird zwischen den inneren Pins ein homogenes Spannungsfeld erzeugt, welches auf der Oberseite zugverspannt ist und auf der Unterseite eine Druckspannung aufweist. In der Mitte des 780 μm dicken Streifens befindet sich eine neutrale Phase, die den Übergang zwischen den beiden Spannungszuständen darstellt. top-down werden zwei Zustände gemessen: Neutralzustand ohne Verbiegung und verbogener Zustand. Wird auf dem Querschnitt über die gesamte Probendicke eine Messreihe aufgenommen, sollte sich ein Spannungsverlauf ergeben, welcher mit den top-down-Messungen korreliert.

Die Resultate des Versuches sind in Abbildung 4-15 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass sich bei der Messung über den Querschnitt der verspannten Probe die Wellenzahl kontinuierlich verschiebt. Das sägezahn-ähnliche Aussehen der Kurve lässt sich auf eine geringfügige Defokussierung zwischen zwei Messpunkten zurückführen. Des Weiteren variiert der Fokus aufgrund leicht abgerundeter Probenkanten bei 0 μm und 780 μm . Dies beeinflusst die Raman-Verschiebung. Die Verschiebung des Ramanspektrums zwischen der oberen und der unteren Probenkante beträgt ca. 0.5 Wellenzahlen, was einem Spannungsunterschied von 240MPa entspricht. Der absolute Wert der mechanischen Spannung beträgt also 120MPa.

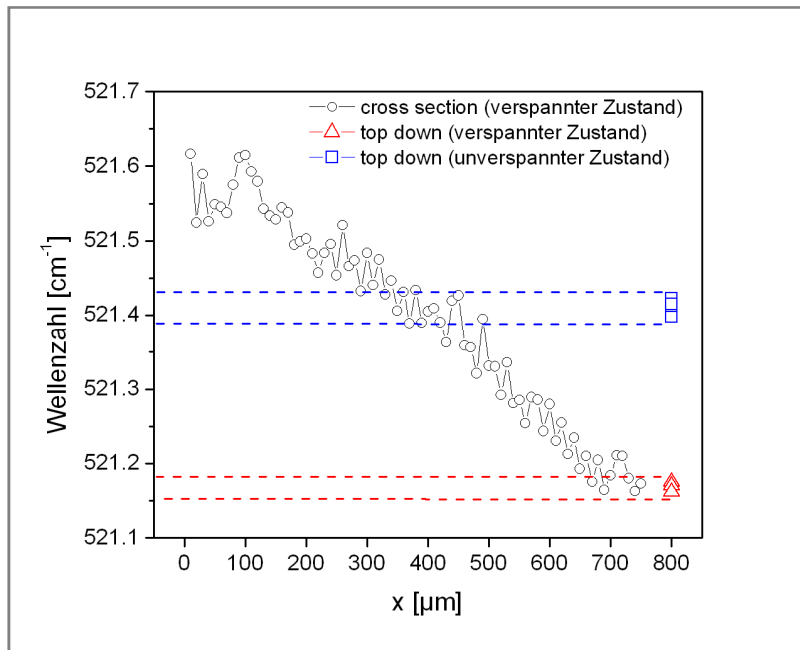


Abbildung 4-15 Vergleich zwischen cross-section- und top-down-Messungen

Bei der Messung auf der Oberfläche (top-down) ergibt sich bei einer unverspannten Probe ein Peak bei $\sim 521,4 \text{ cm}^{-1}$ bzw. im verspannten Zustand bei einer Wellenzahl von $\sim 521,18 \text{ cm}^{-1}$. Im Vergleich zur Messung auf dem Querschnitt entspricht dies dem zugverspannten Bereich bei $z=780 \mu\text{m}$ bzw. der neutralen Faser bei $z=390 \mu\text{m}$. Daraus folgt, dass bei Berechnungen von Spannungswerten aus der Raman-Verschiebung für beide Kristallorientierungen der gleiche Sensitivitätsfaktor $S=2,13$ genutzt werden kann.

Oberflächennahe Querschnittsbereich

Wird der oberflächennahe Bereich ($0 > z > -3 \mu\text{m}$) des Querschnittes hinsichtlich des Spannungszustandes untersucht, dann ist auf Grundlage der top-down-Messungen eine Zugspannung zu erwarten. Diese Annahme wird qualitativ bestätigt (Abbildung 4-16). Im Bereich von $z=0$ bis $z=-0,5 \mu\text{m}$ ist eine deutliche Zugspannung im Silizium zu erkennen, die mit zunehmender Tiefe abklingt und in eine Druckspannung übergeht. Zwischen den beiden TSVs verringert sich die Zugspannung auf ca. die Hälfte ihres Maximalwertes. In einer Tiefe $z < -2 \mu\text{m}$ ist das gesamte Silizium zwischen den beiden TSVs druckverspannt, wobei die Druckspannung an der Probenkante maximal ist und mit steigender Entfernung zur Kante abnimmt. Der Einfluss der Siliziumnitridschicht ist somit lokal auf die erste $2-3 \mu\text{m}$ in z -Richtung begrenzt. Mit steigender Distanz zur Oberfläche wird der Kupfereinfluss immer deutlicher. In Tiefen größer 3 bis $4 \mu\text{m}$ zur Oberfläche kann daraus geschlossen werden, dass der Spannungszustand hauptsächlich durch das Kupfer beeinflusst wird.

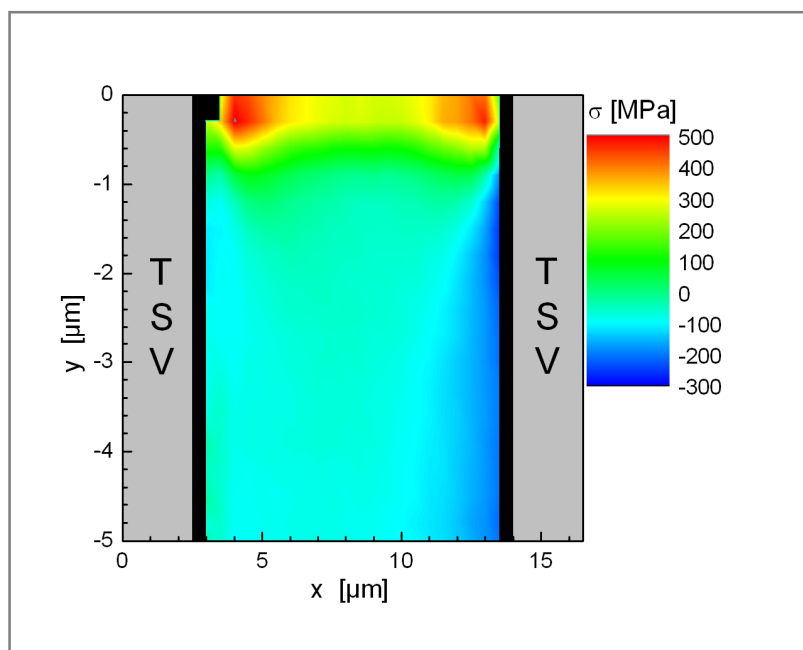


Abbildung 4-16 TSV-Querschnittsmap des oberflächennahen Bereiches

Die absoluten Zugspannungswerte sind im Vergleich zu den top-down-Messungen mehr als doppelt so hoch. Dies lässt sich auf eine geänderte Geometrie durch die Querschnittspräparation zurückführen. In der Ausgangspräparation existiert nur am Übergang zum Kupfer eine Nitridkante, welche durch ihre kompressive Eigenspannung im Silizium eine Zugspannung erzeugt. Im Querschnitt ergibt sich eine zweite Kante (Abbildung 4-17). Wendet man den vorliegenden Fall auf das Filmkanten-Spannungsmodell von Hu [29] an, geht von beiden Kanten eine Kraft F_x und F_y aus. Daraus resultiert eine Erhöhung der Spannung im Silizium.

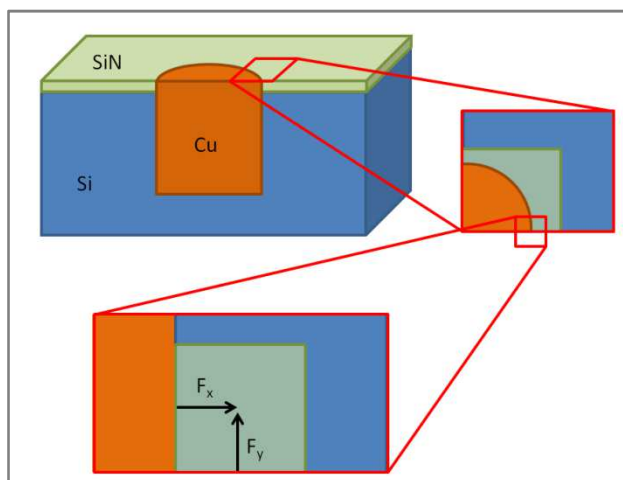


Abbildung 4-17 TSV im Querschnitt - Erklärung Nitridspannung

Mittlerer Querschnittsbereich

Im vorherigen Abschnitt zeigte die Analyse des oberflächennahen Bereiches eine in z-Richtung abklingende, tensile Nitridspannung und zunehmende, kompressive Spannung, welche sich ab in einer gewissen Entfernung ($>3\mu\text{m}$) zur Oberfläche konstant verhält. Dieses Verhalten wird durch weitere Linescans über den gesamten Querschnitt bestätigt. Die in Abbildung 4-19 dargestellten Ergebnisse zeigen das typische Kupfer-Druckspannungsprofil, das in einigen μm -Entfernung zum TSV abklingt. Der TSV-Querschnitt, an dem die Messungen durchgeführt werden, enthält mehrere TSV-Gruppen. Jede Gruppe besteht aus 3 TSVs mit einem Pitch von $20\mu\text{m}$. Für die Untersuchung werden vier verschiedene Positionen (25, 45, 65 und $75\mu\text{m}$) in z-Richtung gewählt.

Qualitativ entspricht der Spannungsverlauf den Messungen aus Kapitel 4.2.2. Die Maximalwerte der Kupferspannungen zeigen aber geringfügige Unterschiede. Die an den mittels CMP präparierten und top-down gemessenen Kupferspannungen (Abbildung 4-8) weisen mit -150MPa geringere Maximalwerte auf als die in Abbildung 4-19 dargestellten Resultate (ca. -200MPa). Ein möglicher Grund ist die, durch die Präparation geänderte Probengeometrie (Abbildung 4-18). Des Weiteren können aufgrund des geringen Pitches die Kupferspannungen zwischen den einzelnen TSVs nicht vollständig abklingen. Im Vergleich der einzelnen Messpositionen zeigt sich ein geringer Unterschied. Ursachen dafür können Messungenauigkeiten, eine minimale Wellenzahlaufösung von $0,02\text{cm}^{-1}$ (ca. $\pm 10\text{MPa}$) bzw. eine inhomogene Oberfläche durch das Polieren sein.

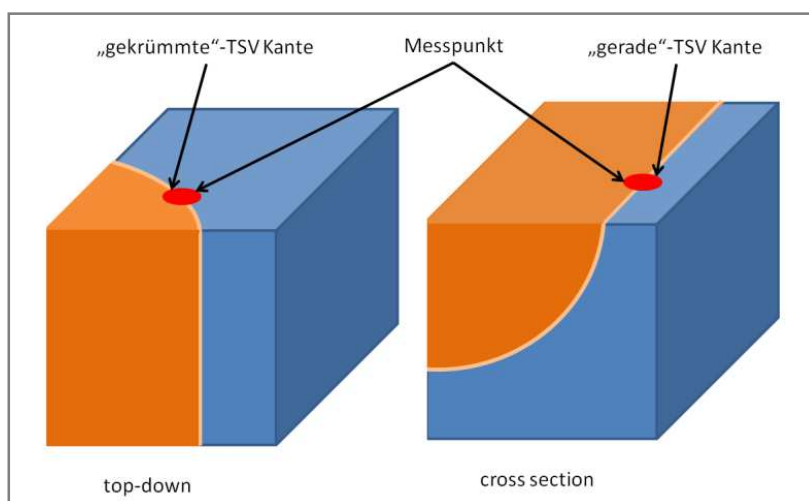


Abbildung 4-18 Geometrievergleich top-down und cross-section

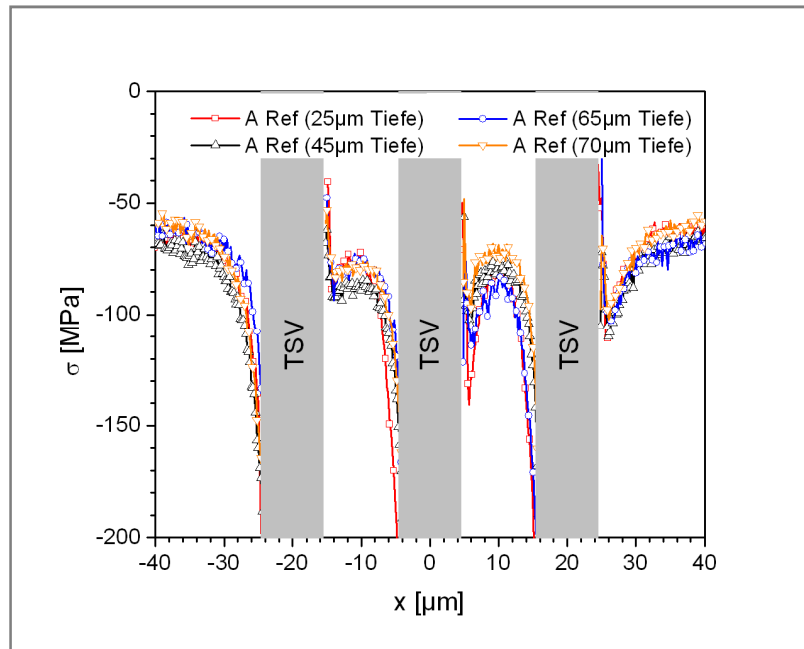


Abbildung 4-19 Spannungsprofil im mittleren Querschnittsbereich Die Linienscans wurden in unterschiedlichen Tiefen ($z=25, 45, 65, 70\mu\text{m}$) durchgeführt. Die Asymmetrie zwischen der linken und rechten Seite eines TSVs ist ein Artefakt und kein realer Messeffekt.

Unterer Querschnittsbereich

Als letzter Abschnitt wird der Fuß-Bereich des TSV-Zylinders auf Spannungen betrachtet. Aufgrund der Geometrie ist es zu erwarten, dass das Spannungsverhalten sich von dem des mittleren Querschnittsbereiches unterscheidet. Die Resultate sind in Abbildung 4-20 dargestellt.

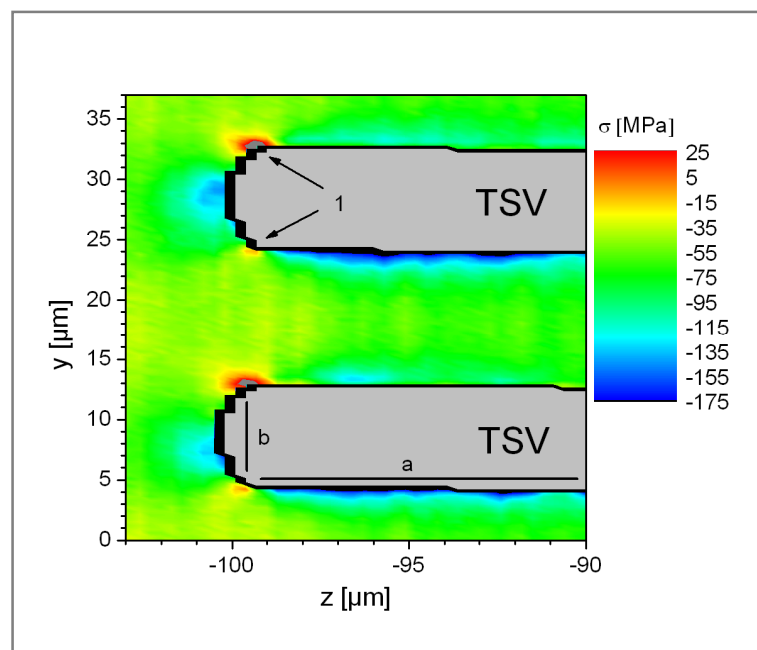


Abbildung 4-20 Übersicht der Spannungen im unteren TSV-Querschnittsbereich

Der Bereich von -90 bis $-98\mu\text{m}$ zeigt das gleiche Druckspannungsverhalten, wie bereits im vorherigen Abschnitt beschrieben. In der Nähe des TSV-Fußes bildet sich an der Ecke jedoch eine schwach tensile Spannungskonzentration (Abbildung 4-20; Punkt 1). Die kurze Kante (a) und die lange Kante (b) stehen senkrecht zueinander und weisen jeweils Druckspannungen auf. In dem Punkt wo sich beide Kanten treffen entsteht die leicht tensile Spannungskonzentration.

4.3.2 Variation der Laser-Eindringtiefe

Eine zweite Möglichkeit, die Tiefenabhängigkeit der Spannungen zu untersuchen, ist die Variation der Laserwellenlänge. Es ist aber nicht möglich, wie bei der TSV-Querschnitts-Präparation, ein Profil über die gesamte Tiefe zu erstellen. Zudem kommt es zur Streuung von Photonen im gesamten Volumen, von der Oberfläche bis zur Messtiefe. In Folge dessen weicht der ermittelte Spannungswert von dem realen Spannungswert in der Tiefe ab. Der Vorteil dieser Methode liegt in ihrem zerstörungsfreien Charakter. Es ist keine zusätzliche Präparation notwendig und der Spannungszustand wird somit nicht verändert.

Über das Filmkanten-Spannungs-Modell von Hu [29] wird die Tiefenabhängigkeit der Spannungen, die durch den SiN-Film im Silizium erzeugt werden, berechnet. Durch die Variation der Wellenlänge des Laserlichtes lässt sich diese theoretische Abhängigkeit experimentell nachweisen. Die Anregungswellenlänge wird dabei von 442nm auf 488 bzw. 633nm umgestellt. Durch die Vergrößerung der Wellenlänge ändert sich die Messtiefe von $0,25\mu\text{m}$ auf $0,5\mu\text{m}$ bzw. $3\mu\text{m}$ (Kapitel 2.2.5). Alle Messungen werden an dem gleichen TSV (G ref-Probe) durchgeführt, um Abweichungen zwischen einzelnen TSVs auszuschließen. In einer Tiefe von ca. $3\mu\text{m}$ ist der gleiche tensile Charakter der Nitridspannungen, welcher bereits in Kapitel 4.2.1 diskutiert wurde, zu erkennen (Abbildung 4-22). Beim Vergleich der Maximalwerte an der TSV-Kante zeigt sich die Tiefenabhängigkeit der Spannung. Der Maximalwert in einer Tiefe von $3\mu\text{m}$ ist im Vergleich zu einer Tiefe von $0,25\mu\text{m}$ 75% kleiner und beträgt 50MPa . Aus den Messungen lässt sich schließen, dass die Nitridspannungen nur im oberflächennahen Bereich ($3-4\mu\text{m}$ Tiefe) eine Rolle spielen und mit steigender Entfernung zur Oberfläche abklingen.

Ausgehend von der Annahme, dass die Nitridspannungen in einer Tiefe von $3\mu\text{m}$ nahezu abgeklungen sind, erfolgt die Untersuchung der gefüllten TSVs mit einer Wellenlänge von 633nm . Es wird die Probe A 380 für die Untersuchung gewählt, da die bishe-

rigen Ergebnisse darauf hindeuten, dass in dieser Probeserie die Kupferspannungen im oberflächennahen Bereich am stärksten ausgeprägt sind. Die Resultate dieser Messreihe sind in Abbildung 4-23 dargestellt. Es zeigt sich eine starke Druckspannung (250MPa) in der Nähe der TSV-Kante. Diese Spannung klingt innerhalb des ersten Mikrometers nach der TSV-Kante ab. Es folgt eine leichte Zugspannung von ca. 40MPa. Die Zugspannung hat eine Reichweite von ca. 15 μm . Der direkte Vergleich der Messkurven ist aufgrund der Spannungsüberlagerung der Nitridschicht schwierig. In der ersten Messkurve (Abbildung 4-23, blaue gedrehte Vierecke) sind wegen der geringen Messtiefe (0,25 μm) sowohl Nitrid, als auch die Kupferspannung enthalten. Im Vergleich dazu sind die Nitridspannungen in der Messtiefe von 3 μm zu 75% abgeklungen. Daraus folgt, dass das Kupferprofil dem der dritten Messung (Abbildung 4-23, rote Quadrate) entspricht. Ähnliche Resultate wurden bereits auf analytischen Weg erreicht [42,43]. Wie bereits in Kapitel 4.2.3 beschrieben, kommt es bei der Temperung durch den unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten zwischen Kupfer und Silizium zu einer irreversiblen, plastischen Verformung des Kupfers. Beim Abkühlen zieht sich das Kupfer im Vergleich zum Silizium stärker zusammen. Dies resultiert in einer Zugspannung im Silizium. Auf Grund der kreisförmigen Struktur des TSVs kommt es in der Nähe der TSV-Kante zu einer Umwandlung der Zugspannung in eine Druckspannung [42]. Die Überlagerung beider Effekte ist schematisch in Abbildung 4-21 dargestellt.

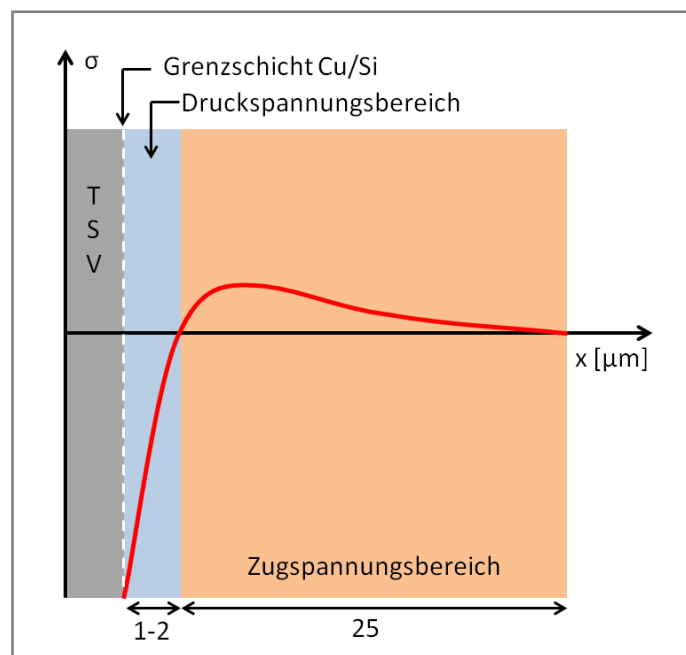


Abbildung 4-21 Schematischer Kupferspannungsverlauf

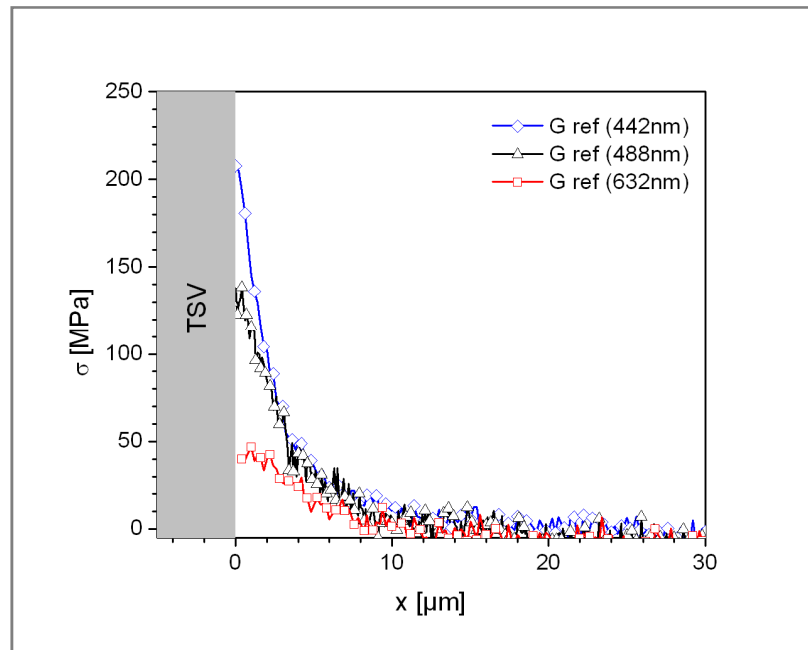


Abbildung 4-22 Tiefenabhängigkeit der Nitridspannungen Für die Untersuchung der Tiefenabhängigkeit wurden drei unterschiedliche Wellenlängen (442nm, 488nm und 632) eingesetzt. Die Messungen wurden an ungefüllten TSV (Probenserie G) durchgeführt.

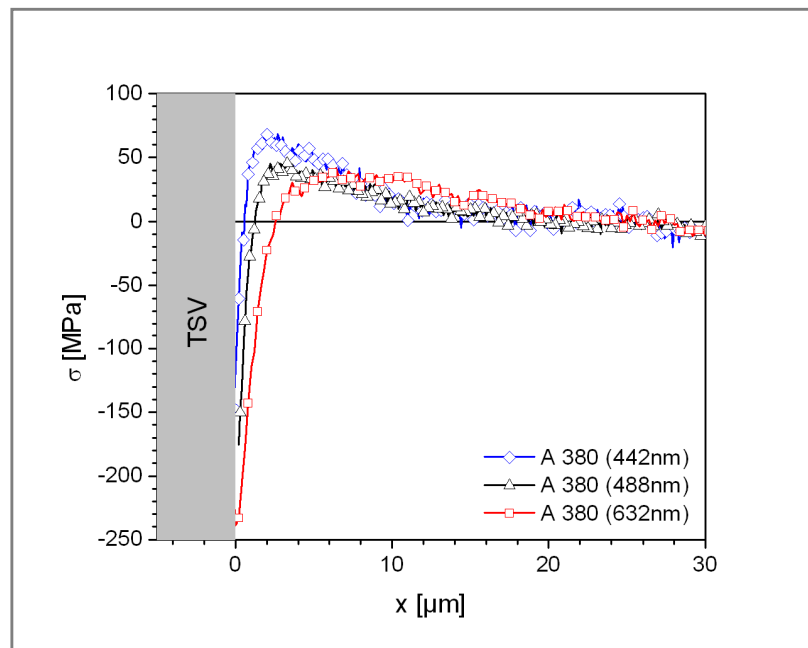


Abbildung 4-23 Tiefenabhängigkeit der Kupferspannungen Für die Untersuchung der Tiefenabhängigkeit wurden drei unterschiedliche Wellenlängen (442nm, 488nm und 632) eingesetzt. Die Messungen wurden an gefüllten TSV (Probenserie A), welche bei einer Temperatur von 380°C für 1h getempert wurden, durchgeführt.

4.4 Mechanische Untersuchungen

Eine Teilaufgabe der Arbeit ist die Untersuchung der Adhäsion der verschiedenen TSV-Grenzschichten. Dafür wurde die Kombination von 4-Punkt-Biege-Technik und der μ -Raman Spektroskopie gewählt. In diesem Kapitel soll aufgezeigt werden, ob es möglich ist, diese Methode für die Detektion oberflächennaher Defekte einzusetzen.

4.4.1 In situ 4-Punkt-Biege-Test und μ -Raman Spektroskopie

Bei der Untersuchung der TSVs auf oberflächennahen Defekten im Kupfer bzw. an der Kupfer-Silizium-Grenzfläche wird ein Probenstreifen (Abmaße 50x3.5mm) in einem Probenhalter (siehe Kapitel 3.3) mechanisch verspannt. Durch die zusätzliche mechanische Spannung sollen Defekte sichtbar werden, die in der konventionellen μ -Raman-Spektroskopie nicht sichtbar sind. Theoretisch sollte sich, aufgrund der homogenen Spannungsverteilung zwischen den inneren Pins (Abbildung 3-6), der Spannungszustand der mechanisch nicht verspannten Probe um den Betrag der mechanischen Spannung verschieben. Dieses Verhalten wird bei einem monokristallinen Siliziumstreifen ohne Strukturen beobachtet (Abbildung 4-24, Probe A). Der Spannungszustand im Ausgangszustand und im mechanisch verspannten Zustand unterscheidet sich um die Biegespannung σ_b , welche in diesen Experimenten ca. 200MPa beträgt. Der mit TSV strukturierte Siliziumstreifen (Abbildung 4-24, Probe B) weist aufgrund der nicht vorhandenen dielektrischen Schichten sowie Kupferfüllung im Ausgangszustand keine mechanische Verspannung auf. Wird durch die mechanische Verspannung eine Biegespannung in das Kristallgitter eingebracht, kann ein inhomogenes Spannungsfeld in der Nähe des TSVs beobachtet werden. Entlang der Biegeachse (y -Richtung) kann eine Zugspannung an der TSV-Kante gemessen werden. Diese Zugspannung ist ca. doppelt so hoch wie die Zugspannung durch die mechanische Verspannung. Senkrecht zur Biegeachse kann an der TSV-Kante eine verringerte Zugspannung im Vergleich zur Biegespannung gemessen werden. Die Ursache für diese Erscheinungen liegt in einer Geometrieänderung des TSV-Kreises. Durch die mechanische Verspannung wird der kreisförmige TSV gestaucht. Es ergibt sich eine elliptische Form.

3D-Maps mechanisch verspannter Proben verschiedener Prozessstufen

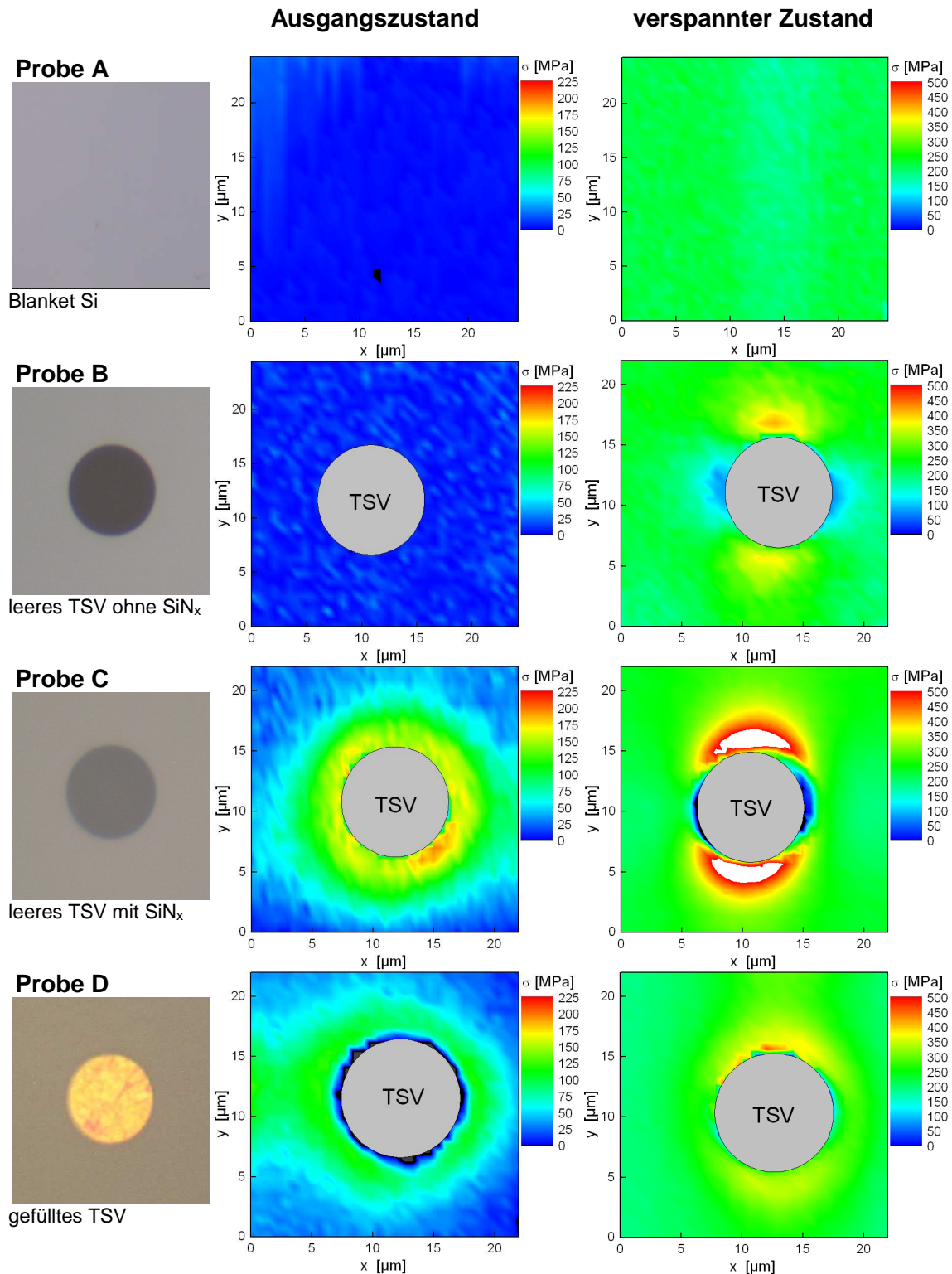


Abbildung 4-24 Einfluss mechanischer Spannungen auf TSV-Proben Es sind Raman-Messungen von Proben mit verschiedenem Aufbau in Ausgangszustand und im mechanisch verspannten Zustand dargestellt. Probe A ist ein monokristalliner Siliziumstreifen. Probe B und C sind Proben mit der TSV-Strukturierung mit und ohne dielektrischer Deckschicht. Probe D enthält vollständig prozessierte TSVs der Probenserie A.

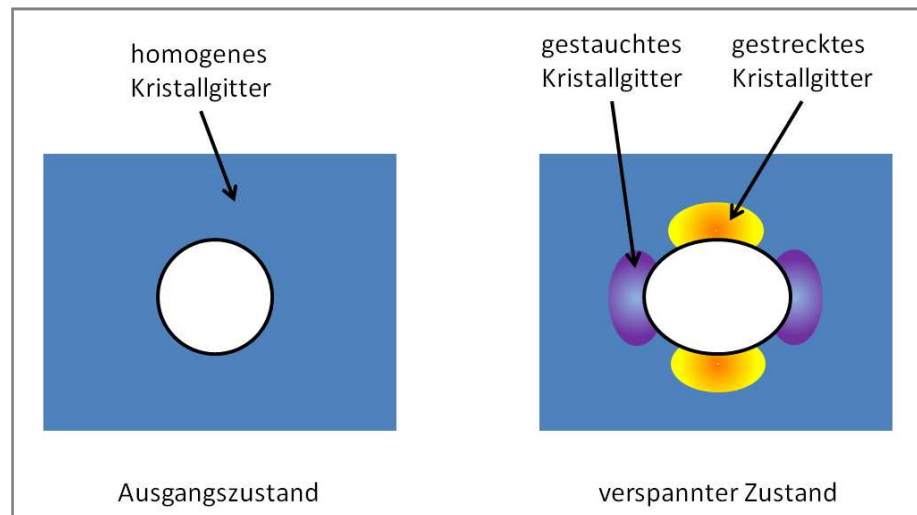


Abbildung 4-25 Kristallstruktur um TSV bei mechanischer Verspannung

In Abbildung 4-25 ist diese Veränderung schematisch dargestellt. Die reale Deformation der Proben ist deutlich geringer als in der Darstellung gezeigt und kann nicht mit dem Lichtmikroskop beobachtet werden. Die Probe C entspricht der Probenserie G und enthält neben der TSV-Strukturierung auch die dielektrischen Deckschichten. Im Ausgangszustand ist die typische Nitridspannung um das TSV messbar. Wird der TSV mechanisch verspannt, zeigt sich ein ähnlicher Zustand wie bei der verspannten Probe B. Der Maximalwert für die Zugspannung ist aufgrund der vorhandenen Nitridspannung deutlich höher. Ein gefülltes TSV (Probe D) weist im Ausgangszustand durch den kompressiven Anteil der Kupferspannungen eine geringere Zugspannung an den TSV-Kanten auf als das ungefüllte TSV. Bei mechanischer Belastung ist der Effekt der Spannungsüberhöhung an TSV-Kanten entlang der Biegeachse, wie er bei den ungefüllten TSV-Proben festgestellt werden kann, deutlich abgeschwächt. Kupfer wirkt durch seine Eigenspannung der Verformung entgegen. Die Geometrie des TSV wird folglich nur geringfügig geändert. Die Folge ist ein weniger ausgeprägtes Spannungsprofil an den TSV-Kanten.

4.4.2 Oberflächennahe Defekterkennung

Auf Grundlage der Ergebnisse aus Kapitel 4.4.1 soll in diesem Kapitel der Einfluss von gezielt eingebrachten Defekten auf den Spannungszustand untersucht werden. Hierfür gibt es verschiedene Varianten, um Defekte an und in TSV zu generieren:

- (1) Indents im Kupfer
- (2) Indents im Silizium
- (3) Ätzprozess mit Fluorwasserstoffsäure
- (4) FIB-Schnitte im Kupfer

Die Defekte in Variante (1) und (2) werden mittels eines Nano-Indenter in einem SEM erzeugt (Abbildung 4-26). Bei den Indentationen sind das elastische Verhalten des Kupfers und die Geometrie der Indenterspitze eine Limitierung in Bezug auf die Positionierung und Größe der Indentation. Indentationen im Silizium erzeugen eine sehr große Störung des Siliziumkristallgitters (Spannungen bis 3GPa). Folglich ist es schwierig, zwischen Delaminierungseffekten und Kristalldefekten zu unterscheiden.

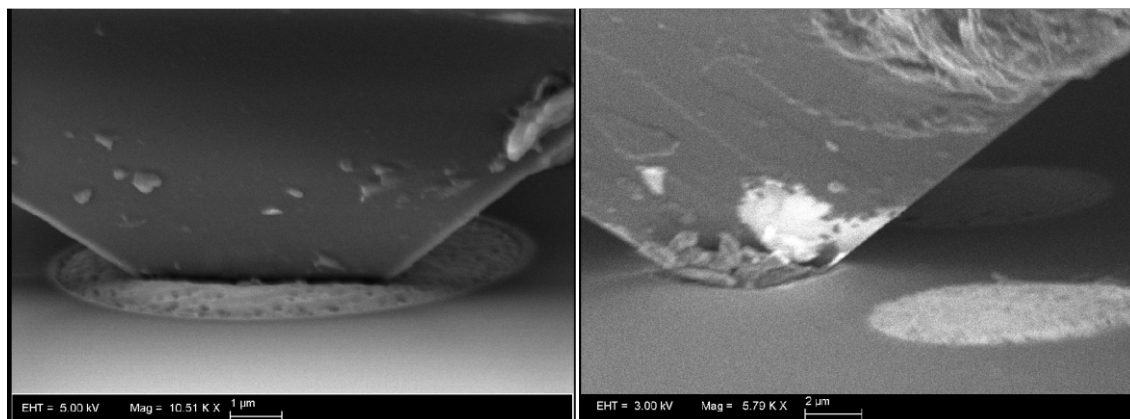


Abbildung 4-26 SEM-Aufnahmen von Nanoindentationen Im linken Bild ist ein Kupferindent bei einer Normalkraft von 16,5mN dargestellt. Der Siliziumindent im rechten Bild erfolgte bei einer Normalkraft von 300mN¹.

Die Variante (3) beruht auf der Schädigung des Oxidliners durch eine chemische Reaktion mit Fluorwasserstoffsäure. Dabei wird außerdem der dielektrische Schichtaufbau entfernt und die Oberflächenrauigkeit erschwert Raman-Messungen. Bei der Variante (4) werden durch den Einsatz eines „focused ion beam“ oberflächennahe Schädigungen im Kupfer erzeugt. Es ist möglich, Defekte mit unterschiedlicher Dimensionen und Geometrien lokal begrenzt zu erzeugen. Deshalb wird diese Methode den anderen Varianten vorgezogen.

¹ Die Nanoindentationen wurden durch Martin Brückner am in situ Nanoindenter (SEM) im Center for Complex Analysis (CCA) bei GLOBALFOUNDRIES durchgeführt.

Bei Probe E (Abbildung 4-27) wird mittels FIB eine kreisrunde Fläche mit einem Durchmesser von ca. $10\mu\text{m}$ bis in eine Tiefe von $5\mu\text{m}$ auf dem Kupfer entfernt. Im Ausgangszustand liegt das Spannungsprofil von den Maximalwerten zwischen denen der Probe C und D (Abbildung 4-24). Eine klare Aussage zur Schädigung des TSVs ist schwierig, da bereits der Messfehler ca. $\pm 20\text{MPa}$ beträgt. Durch eine zusätzliche mechanische Spannung kann dieser Defekt jedoch eindeutig detektiert werden (Abbildung 4-27, gebogener Zustand). Hierbei zeigt sich das gleiche Spannungsverhalten eines leeren TSV, der mechanisch verspannt wird. Durch die Entfernung des oberflächennahen Kupfers kann sich die Geometrie geringfügig ändern. Dies hat zur Folge, dass die Spannungsüberhöhungen an der TSV-Kante sichtbar werden. Bei Probe F ist die Fläche des Defektes deutlich reduziert. Im Ausgangszustand kann keine Schädigung eindeutig lokalisiert werden. Durch die überlagerte mechanische Spannung im verspannten Zustand wird der Defekt sichtbar. Unterhalb des TSV ist im Vergleich zum Bereich oberhalb des TSV eine tensile Spannungserhöhung sichtbar. Des Weiteren ist auf der rechten Seite des TSVs eine Spannung nahe 0MPa messbar. Im Vergleich zur linken Seite ist diese Spannung deutlich niedriger. Sowohl die Spannungsüberhöhung unterhalb, als auch die Spannungsreduktion rechts des TSV deuten auf einen Defekt im unteren rechten Viertel des TSV hin. Dies stimmt mit der FIB-Schädigung überein. Da Defekte in den Größenordnungen der Proben E und F sehr selten vorkommen und eine Delamination der Grenzflächen nachgewiesen werden soll, ist die Schädigung bei Probe G und H deutlich geringer. Bei diesen Proben ist lediglich im interfacenahen Bereich eine FIB-Schädigung mit einer Breite von $0.5\mu\text{m}$ und einer Tiefe von $5\mu\text{m}$ vorhanden. Bei beiden Proben ist die Schädigung im Ausgangszustand nicht sichtbar. Bei zusätzlicher mechanischer Verspannung ist das typische Spannungsprofil eines leeren TSV (Probe C) sichtbar. Im Vergleich zu Probe C sind die Spannungswerte oberhalb und unterhalb des TSV insgesamt jedoch niedriger. Auch die Spannungsreduktion rechts und links vom TSV fallen niedriger aus. Bei der Probe H besteht die FIB-Schädigung aus einem $\frac{1}{4}$ Kreisbogen. Der Defekt kann im verspannten Zustand erkannt werden. Jedoch ist dies im Vergleich zu größeren Defekten (Probe F) deutlich schwieriger.

Insgesamt zeigt sich, dass durch die zusätzliche mechanische Spannung eine Defekterkennung möglich ist. Große Defekte wie in Probe E und F sind leicht zu detektieren. Bei kleineren Defekten fällt die Detektion schwerer, ist aber grundsätzlich möglich.

3D-Maps gebogener/ungebogener Proben nach FIB Schädigung

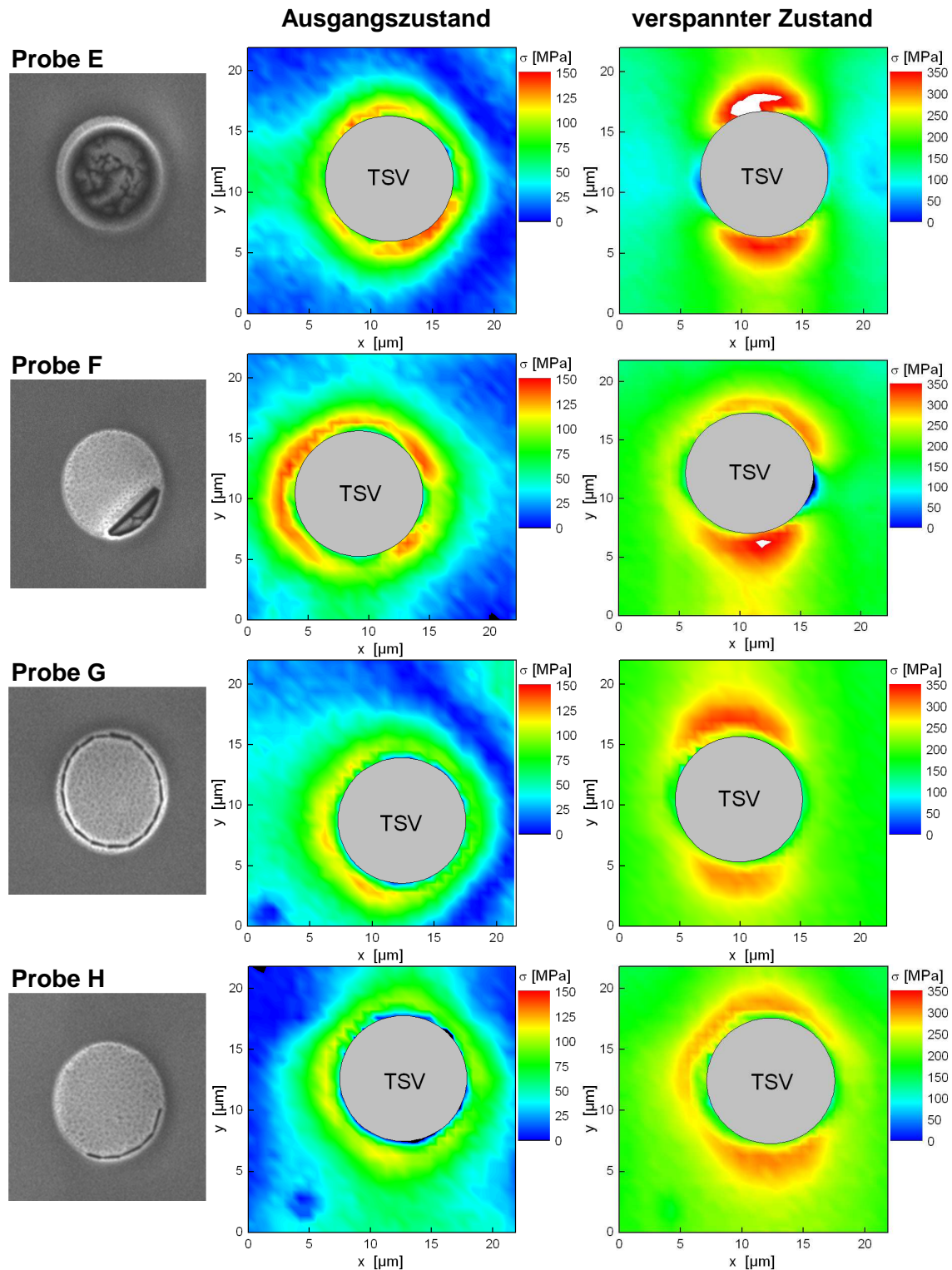


Abbildung 4-27 Einfluss mechanischer Spannungen auf TSVs mit Defekten In der Abbildung sind Raman-Messungen an TSVs, welche durch FIB künstlich geschädigt wurden, im mechanisch verspannten und nicht verspannten Zustand dargestellt. Probe E und F enthalten eine Flächenschädigung (vollständiger Kreis bzw. viertel Kreisfläche). Bei Probe G und H wurde die Silizium-Kupfer-Grenzschicht mit einem vollständigen bzw. viertel Kreisbogen geschädigt.

5. Zusammenfassung und Ausblick

Thesen

Die μ -Raman-Spektroskopie eignet sich sehr gut für die Analyse von Spannungszuständen an TSV-Strukturen mit μm -Dimensionen in beiden Kristallorientierungen (001) und (110). Sowohl top-down Messungen und Messungen auf eine Querschnittspräparation sind möglich.

Es existieren zwei Ursachen, welche Spannungen im Silizium an TSV verursachen. Neben der Kupferspannung zählt der dielektrische Schichtaufbau dazu.

Kupferspannungen verursachen einen kompressiven Spannungszustand mit Maximalwerten von -350MPa . Die Spannungen klingen mit steigender Entfernung zum TSV ab und sind nahezu homogen über die gesamte Tiefe des TSVs verteilt. Bei Geometrieänderung an der Oberfläche oder am Fuß des TSVs kann der Spannungszustand abweichen.

Kupferspannungen werden durch einen zusätzlichen Wärmeeintrag bei Temperaturen von bis zu 380°C verstärkt und können in der Nähe der TSVs bis zu -350MPa betragen. Dieser Wärmeeintrag bewirkt eine Protrusion des Kupfers.

Spannungen im Silizium können durch dielektrische Schichten an Kanten von TSVs erzeugt werden. Der Spannungswert hängt von der Filmdicke und der intrinsischen Spannung der Nitridschicht ab. In dem vorliegenden Fall wurden Maximalwerte von 250MPa gemessen. Die Oxidschicht hat einen geringen Einfluss (ca. 20MPa) auf den Spannungszustand.

Die Reichweite der Spannungen liegt in x- und y-Richtung bei $25\mu\text{m}$ und in z-Richtung bei ca. $5\mu\text{m}$. Die durch die dielektrischen Schichten erzeugten Spannungen sind temperaturstabil.

Für beide Kristallorientierungen (001) und (110) kann für das uniaxiale Spannungsmodell der gleiche Sensitivitätsfaktor von $S=2,13$ verwendet werden.

Die Variation der Laser-Wellenlänge ist ein geeignetes Mittel, um den Spannungszustand in verschiedenen oberflächennahen Tiefen zu untersuchen, ohne die Probe zu zerstören.

Mechanisch verspannte TSVs ändern ihre kreisförmige Geometrie an der Oberfläche zu einer elliptischen Geometrie. Daraus resultiert eine Zugspannung entlang der Biegeachse an den TSV-Kanten und eine Spannungsreduktion senkrecht zur Biegeachse.

Die Kombination von 4-Punkt-Biege-Tests und μ -Raman-Spektroskopie ermöglicht es, Defekte an TSV-Strukturen zu erkennen, welche in der konventionellen μ -Raman-Spektroskopie nicht sichtbar sind.

Verspannte dielektrische Schichten könnten für die Reduktion der oberflächennahen Kupferspannungen eingesetzt werden.

Ausblick

Nach erfolgreichen Messungen an TSV-Strukturen mittels μ -Raman-Spektroskopie können Untersuchungen in einigen Bereichen intensiviert werden. Es ist denkbar, den Einfluss der Kupferspannungen an Proben zu untersuchen, welche ohne dielektrische Deckschichten gefertigt sind. Dies würde eine genauere Untersuchung der Kupferspannung in Abhängigkeit von der Abscheide- und Temperatortemperatur ermöglichen.

Untersuchungen an Proben mit unterschiedlichen Schichtdicken und intrinsischen Spannungswerten für das Siliziumnitrid können die Grundlage für die Reduktion der Kupferspannungen durch Überlagerungseffekte darstellen.

Der Einfluss der durch Temperung erzeugten Kupfer-Protrusionen auf den Spannungszustand im Silizium könnte wichtige Informationen zum Verständnis der Protrusions-Mechanismen vermitteln.

Weitere Untersuchungen an höher getemperten Proben ($T > 380^\circ\text{C}$) mit verschiedenen Aufheizphasen und unterschiedlichen Zeiten könnten weitere Anhaltspunkte für die Erklärung des Kupferspannungsverhaltens liefern. Es ist auch denkbar, durch Änderung der Polarisation des einfallenden Lichtes eine andere Mode zu beobachten und zusätzliche Informationen zum Spannungstensor zu erlangen.

Layout-Effekte, wie z.B. Spannungsüberlagerungen, könnten durch Untersuchungen mit unterschiedlichen TSV-Durchmessern, Tiefen und Anordnungen experimentell nachgewiesen werden.

Die experimentell gewonnenen Daten können als Grundlage einfacher analytischer Modelle dienen, welche es ermöglichen könnten den Spannungszustand bei einem vorgegebenen System zu berechnen.

Danksagung

Zuerst möchte ich mich bei Dr. Michael Hecker für das Vertrauen und die Möglichkeit bedanken, meine Bachelorarbeit bei GLOBALFOUNDRIES im Center for Complex Analysis (CCA) zu absolvieren.

Vielen Dank an Dr. Gerd Dost (FH Mittweida) und Dr. Michael Hecker (GLOBALFOUNDRIES) für die Betreuung und Begutachtung meiner Arbeit.

Die Themenstellung dieser Arbeit wurde erst durch einen internen Auftrag der 3D-Integrationsgruppe (Technology & Integration) an das CCA möglich. Für den Auftrag und die vielen hilfreichen Fachgespräche möchte ich Jens Oswald, Michael Thiele und Christian Götze danken.

Vielen Dank an Dr. Martin Weisheit für die AFM-Messungen und die lehrreichen Gespräche während meiner gesamten Zeit im CCA.

Ein besonderer Dank gilt Marco Hensel, welcher mir zahlreiche Hinweise zur Probenpräparation gab und mir stets tatkräftig bei der Präparation der Proben geholfen hat.

Des Weiteren möchte ich mich bei den anderen Mitarbeitern und Studenten im CCA und speziell im Bereich „Adhesion“ für ihre Hilfsbereitschaft und die angenehme Arbeitsatmosphäre bedanken.

Ich möchte außerdem Dipl.-Ing. Herbert Postler für seine stets interessanten Vorträge und Projekte während meiner Zeit am Marie-Curie-Gymnasium danken. Durch Sie habe ich überhaupt den langen Weg des Studiums eingeschlagen.

Mein größter Dank gilt meinen Eltern und Großeltern. Sie haben mich während meiner ganzen Studienzeit aus ganzem Herzen immer unterstützt und motiviert.

Ohne Freunde und Familie wäre meine Studienzeit wohl nur halb so schön und erfolgreich gewesen. Herzlichen Dank dafür!

Zum Schluss möchte ich mich noch bei allen fleißigen Korrekturlesern bedanken.

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass die vorliegende Arbeit mit dem Titel:

Charakterisierung von mechanischen Spannungen und Defekten an „Through-Silicon-Via“-Strukturen

eigenständig von mir verfasst wurde. Alle Hilfsmittel, welche Ich für die Anfertigung der Arbeit genutzt habe, wurden von mir durch entsprechende Zitate und Quellen in den entsprechenden Passagen gekennzeichnet. Die Arbeit wurde bisher in gleicher oder ähnlicher Form keinem anderen Prüfungsamt vorgelegt und auch nicht veröffentlicht.

Dresden 21.09.2011

Literaturverzeichnis

- [1] G. E. Moore.
Cramming more components onto integrated circuits.
Electronics, 38:114, 1965.
- [2] E. Bonnert.
AMD Fusion: Stromspar-Feinheiten im 32-nm-Chip.
Heise Newsartikel vom 09.02.2010.
URL: <http://heise.de/-925111>.
- [3] Nian Yang et al.
A Comparative Study of Gate Direct Tunneling and Drain Leakage Currents in N-MOSFET's with Sub-2-nm Gate Oxides.
IEEE Transactions on electron devices, 47:1636, 2000.
- [4] W. Arden et al.
"More-than-Moore" White Paper.
ITRS, 2009.
- [5] X.Gagnard et al.
Through silicon via: From the CMOS imager sensor wafer level package to the 3D integration.
Microelectronic Engineering, 87:470, 2010.
- [6] International Technology Roadmap for Semiconductors
EDITION INTERCONNECT
ITRS,S.8, 2009:
- [7] Hu, S. M. et al.
Stress-related problems in silicon technology.
Journal of Applied Physics, 70:53, 1991.
- [8] Yi-Ming Sheu et al.
Modeling mechanical stress effect on dopant diffusion in scaled MOSFETs
Electron Devices, 52:30, 2005.
- [9] A. Hamada et al.
Hot-Electron Trapping Activation Energy Under Mechanical Stress.
Digest of Technical Papers Symposium on
VLSI Technology, S.15, 1993.

- [10] L. Washington et al.
pMOSFET with 200% Mobility Enhancement Induced by Multiple Stressors.
IEEE Electron Device Letters, 27:511, 2006.
- [11] Z. Krivokapic, et al.
Locally Strained Ultra-thin Channel 25nm Narrow FDSOI Devices with Metal Gate and Mesa Isolation.
Proc. IEDM, S. 445, 2003.
- [12] S. E. Thompson et al.
Uniaxial-Process-Induced Strained-Si: Extending the CMOS Roadmap.
IEEE Transactions on electron devices, 53:1010, 2006.
- [13] IMEC
3D interconnect modeling, reliability and characterization.
Scientific Report 2010.
- [14] K.H. Lu et. al.
Thermo-Mechanical Reliability Challenges of 3D Interconnects.
SRC Project Review, 2010.
- [15] A. Armigliato et al.
State of the art of stress measurements in silicon.
STREAM CONSORTIUM, 1999.
- [16] E. Zschech.
Advanced Nanoanalysis Techniques Part 9.
Institute for Nondestructive Testing Dresden, 2010.
- [17] C. V. Raman, K. S. Krishnan.
A New Type of Secondary Radiation.
Nature 121:501,1920.
- [18] M. Schmitt et al.
Raman spectroscopy at the beginning of the twenty-first century.
Journal of Raman Spectroscopy,37: 20, 2006.
- [19] A. Kudelski
Analytical applications of Raman Spectroscopy.
Talanta, 76:1,2008.

-
- [20] D. C. Harris et al.
*Symmetry and Spectroscopy -
An Introduction to Vibrational and Electronic Spectroscopy.*
Dover Publications Inc, S. 94, 1989.
- [21] B. Schrader et al.
Infrared and Raman Spectroscopy – Methods and Applications.
VCH Verlagsgesellschaft mbH, S. 21, 1995.
- [22] R. Loudon et al.
The Raman effect in crystals.
Adv. Phys., 13:423, 1964.
- [23] I. De Wolf et al.
*Mirco-Raman Spektroskopie to study local mechanical stress in ‘
silicon intefrated circuits*
Semiconductor Science. Technology, 11:139, 1996.
- [24] S. Ganesan et al.
A lattice theory of morphic effectsin crystals of the diamond structure.
Annals of Physics, 56:556-594, 1970.
- [25] E. Anastassakis et al.
Effect of static uniaxial stress on the Raman spectrum of silicon.
Solid State Communications, 8:133, 1970.
- [26] I. De Wolf et al.
*Stress measurements in silicon devices through Raman Spectroscopy:
Briding the gap between theory and experiment.*
Journal of Applied Physics, 79:7148,1 996.
- [27] I. De Wolf et al.
*Addendum to: Stress measurements in silicon devices through
Raman spectroscopy: Bridging the gap between theory and experiment.*
Journal of Applied Physics, 85:7484, 1999.
- [28] E. Annastassakis.
Strain characterization of semiconductor structures and superlattices.
ARW-Nato, 1991.
- [29] S.M. Hu et al.
Film-edge-induced stress in silicon substrates.
Appl. Phys. Lett. 32:5, 1978.

- [30] E. Anastassakis et al.
Piezo-Raman measurements and anharmonic parameters in silicon and diamond.
Physical Review Letters, B41:7529, 1990.
- [31] M. Chandrasekhar et al.
Effects of interband excitations on raman phonons in heavily doped n-Si.
Physical Review Letters, B17:1623, 1978.
- [32] M. Hecker et al.
Analytics and Metrology of Strained Silicon Structures by Raman and Nano-Raman Spectroscopy.
AIP Conf. Proc.,931:435, 2007.
- [33] Suk-Kyu Ryu et al.
Impact of Near-Surface Thermal Stresses on Interfacial Reliability of Through-Silicon-Vias for 3-D Interconnects.
IEEE Transactions on Device and Materials Reliability, 11:35, 2011.
- [34] I.M. Watt
The principles and practice of electron microscopy.
Press Syndicate of the University of Cambridge, 2nd editon, 1997.
- [35] J-I Takahashi et al.
Raman scattering measurement of silicon-on-insulator-substrates formed by high-dose oxygen-ion-implanting.
Journal of Applied Physics 63:87,1988.
- [36] I. De Wolf et al.
Raman and Luminescence Spectroscopy for Microelectronics Catalogue of optical and physical parameters
"Nostradamus"-project, S.16, 1998.
- [37] E. D- Palik.
Handbook of Optical Constants in Solids.
Academic Press NY, S. 529.
- [38] F. Laermer et al.
Milestones in Deep Reactive Ion Etching.
International conference on solid state sensors, actuators and microsystems, S. 1118, 2005.

-
- [39] M. Jung et al.
TSV Stress-aware Full-Chip Mechanical Reliability Analysis and Optimization for 3D IC.
Design Automation Conference (DAC), June 2011.
- [40] C. S. Selvanayagam et al.
Modeling Stress in Silicon with TSVs and its Effects on Mobility.
11th Electronics Packaging Technology Conference (EPTC '09), S. 612, 2009.
- [41] K. Dransfeld et al.
Physik I; Mechanik und Wärme, Band 1.
Oldenbourg Wissenschaftsverlag, S. 341, 2005.
- [42] C. McDonough et al.
Thermal and Spatial Profiling of TSV-induced Stress in 3DICs.
Reliability Physics Symposium (IRPS), 5D.2.1, 2011.
- [43] C. Okoro et al.
Extraction of the Appropriate Material Property for Realistic Modeling of Through-Silicon-Vias using μ -Raman Spectroscopy.
Interconnect Technology Conference (ITC), 16, 2008.
- [44] G. D. Wilk et al.
High-k gate dielectrics: Current status and materials properties considerations.
Journal of Applied Physics 89:5243, 2001.
- [45] Advanced Micro Devices (AMD).
AMD-K5 Processor (Datenblatt).
S. 11, 1997.
- [46] R. Lerch et al.
Technische Akustik; Grundlagen und Anwendungen.
Springer-Verlag Berlin Heidelberg, S. 102, 2009.
- [47] E. Anastassakis et al.
Strain characterization of polycrystalline diamond and silicon systems.
Journal of Applied Physics, 86:249, 1999.
- [48] A. Smekal.
Zur Quantentheorie der Dispersion.
Die Naturwissenschaften, 11:873, 1923.

- [49] K. F. Dombrowski.
*Micro-Raman Investigation of Mechanical Stress in
Si Device Structures and Phonons in SiGe*.
Dissertation TU Cottbus, 2000.