

令和 6 年 5 月 24 日現在

機関番号：32663

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2021～2023

課題番号：21K04886

研究課題名(和文) 次世代ロジック半導体におけるルテニウムやグラフェン配線の熱マネジメント

研究課題名(英文) Thermal Management of Ru and Graphene Interconnects in Next-Generation Logic Semiconductors

研究代表者

ジャン テンゾウ (Zhan, Tianzhuo)

東洋大学・学際・融合科学研究科・准教授

研究者番号：00803389

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：次世代ロジック半導体の配線材料として期待されているルテニウム配線の熱マネジメントに向けた界面熱抵抗について研究を行ってきた。スパッタリングを用いて界面組成の異なる様々な配線/中間層/層間絶縁膜積層構造を作製した。積層構造の界面熱抵抗が周波数領域サーモフレクタンス法で測定された。エネルギー分散X線分光計を装備したTEM装置を使用し、断面構造の撮影および元素マッピングを行った。硬X線光電子分光法を使用して積層構造の深く埋もれた界面の結合状態を測定した。測定された界面熱抵抗をパラメーターとして用いて有限要素法シミュレーションで次世代ロジック半導体の配線の温度上昇が計算された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、界面熱輸送に関わる理解を深め、界面熱抵抗を制御することでロジック半導体の熱マネジメント技術革新をもたらすと期待される。また、半導体デバイス、伝熱工学、界面化学などの様々な分野に関わる学問と技術の融合を推進すると期待される。本研究によって推進されるロジック半導体の熱マネジメント技術の実利用と普及をできれば、ロジック半導体の更なる高性能化及び低消費電力化を実現でき、情報爆発時代において半導体デバイスの消費電力を大幅に削減し、省エネ、低炭素化社会に貢献すると期待される。

研究成果の概要(英文)：Effects of thermal boundary resistance (TBR) on the thermal management of ruthenium interconnects, which are promising candidates as next-generation logic semiconductor interconnect materials, were investigated. Various wire/interlayer/dielectric film stack structures with different interfacial properties were prepared using sputtering method. The TBRs of the stack structures were measured using the frequency-domain thermoreflectance method. A TEM instrument equipped with an energy-dispersive X-ray spectrometer was employed to image the cross-sectional structures and elemental mapping. Hard X-ray photoelectron spectroscopy was used to investigate the bonding states of deeply buried interfaces in the film stacks. The temperature rise of next-generation logic semiconductor interconnects was calculated using finite element method simulations, with the measured TBR as a significant parameter.

研究分野：薄膜、表面界面物性

キーワード：配線 界面熱抵抗 ルテニウム

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19（共通）

### 1. 研究開始当初の背景

IoT、人工知能、超高速通信 5G を迎えた情報爆発時代において、膨大なデータ量を高速に処理するために極めて高い処理性能を備える CPU や GPU などのロジック半導体が求められている。これまで、ロジック半導体の高性能化および低消費電力化は主に微細化によって実現されてきた。しかし、今後はさらに微細化が進むにつれ、放熱問題が最先端ロジック半導体のさらなる高性能化および低消費電力化にとって避けて通れない課題となる。

国際デバイスおよびシステムロードマップ (IRDS) によると、2 nm 世代以降の最先端ロジック半導体における配線の幅は 10 nm 以下に縮小されていく見込みである。こうした細い配線では、急激に増大する電気抵抗と電流密度が大量のジュール熱を発生し、配線の温度を上昇させる。その結果、エレクトロマイグレーションに起因する断線、抵抗増大、絶縁不良などの現象が顕在化し、ロジック半導体の性能と信頼性を低下させ、消費電力を増加させる。したがって、最先端ロジック半導体における配線の熱マネジメント技術が切実に求められている。

配線で発生する熱は、配線/ライナー、ライナー/バリア、バリア/層間絶縁膜などの界面を通過し、空冷式または水冷式で基板に取り付けられたヒートシンクから排出される。配線構造の代表長さが熱キャリアであるフォノンの平均自由行程より長い場合、熱輸送は拡散輸送となり、全体熱抵抗は薄膜自体の熱抵抗によって支配される。微細化に伴い配線構造の代表長さがフォノンの平均自由行程と同程度またはそれより短くになると、熱輸送は弾道的な様相を呈し、多層配線の全体熱抵抗は界面熱抵抗によって支配されるようになる。

フォノン状態密度のミスマッチに基づく予測モデル Diffuse Mismatch Model (DMM) は、異種材料の界面熱抵抗の予測に広く用いられている。しかしながら、DMM においては界面での相互拡散や界面結合などの影響が全く考慮されていないため、実験値と比べてしばしば界面熱抵抗が過小評価されている。例えば、金属/絶縁体の界面熱抵抗の DMM による予測値は  $1\sim 10\text{ m}^2\text{K/GW}$  であるが、実験値は  $100\text{ m}^2\text{K/GW}$  に達する可能性がある。これは 100 nm のアモルファス  $\text{SiO}_2$  薄膜の熱抵抗に相当する。このような高い界面熱抵抗はロジック半導体の温度上昇に大きな影響を与えると考えられる。ロジック半導体における配線と層間絶縁膜の界面熱抵抗を抑えるためには、界面熱抵抗の決定要因を解明する必要がある。

### 2. 研究の目的

銅の電子の平均自由行程 (約 40 nm) は長いため、現在主流である銅配線の幅は 10 nm 以下への微細化が進むにつれ、結晶粒界や表面での電子散乱によって配線抵抗が急激に増加する。また、温度上昇に伴いエレクトロマイグレーション効果が顕著になり、配線の短絡や断線、絶縁不良、抵抗増大といった不具合が多く発生する。そのため、短い電子の平均自由行程 (約 6.6 nm) を持ち、高いエレクトロマイグレーション耐性を備えるルテニウム (Ru) は、銅に代わる次世代配線材料として期待されている。

本研究では、これまで取り組んできた研究をさらに発展させ、銅配線ではなく次世代ロジック半導体の配線材料として期待されている Ru に着目し、次世代ロジック半導体において Ru 配線の界面熱抵抗の支配要因を、界面分析手法を用いて解明し、放熱に向けた最適な積層構造と成膜プロセスを明らかにすることを目的とする。

### 3. 研究の方法

#### 3.1 積層構造の作製と界面熱抵抗の評価

図 1 には、多層配線構造および周波数領域サーモリフレクタンス法の測定システムの概略図が示されている。スパッタリングで Si 基板上に界面組成の異なる様々な配線/中間層/層間絶縁膜薄膜積層構造を作製した。Ru と Si 基板の自然酸化膜はそれぞれ配線金属と層間絶縁膜として使用された。Ti、Ta、TiN、TaN は中間層として配線層と絶縁層の間に成膜された。また、スパッタリングガスである Ar/N<sub>2</sub> の組成比

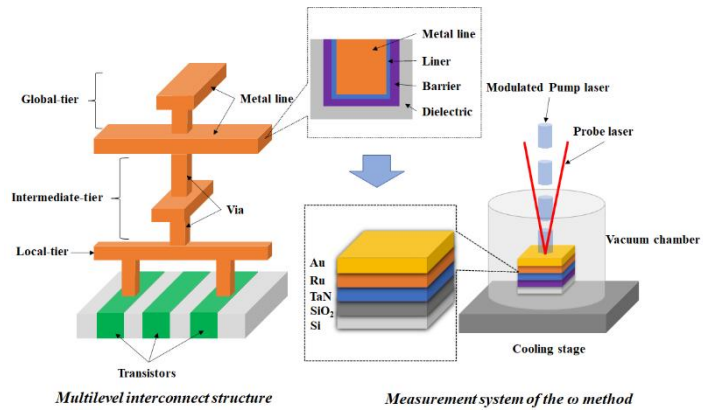


図 1 多層配線構造および周波数領域サーモリフレクタンス法の測定システムの概略図

を変えることで TiN と TaN 中間層の窒素含有量が調整された。配線積層構造の界面熱抵抗が周波数領域サーモリフレクタンス法で測定された。

### 3.2 界面分析による界面熱抵抗の決定要因の解明

エネルギー分散 X 線分光計(EDS)を装備した TEM 装置を使用し、断面構造の撮影および元素マッピングを行った。従来の XPS 装置は低エネルギーの X 線 (AlK $\alpha$ , 1.5 keV) を使用しており、光電子の運動エネルギーが制限されていた。運動エネルギーの低い電子は非弾性平均自由行程が短いため、試料表面から数 nm の深さまでしか測定できなかった。それに対して本研究では、HAXPES (GaK $\alpha$ , 9.25 keV) を使用して積層構造の深く埋もれた界面の結合状態を測定した。

### 3.3 有限要素法シミュレーションによる界面熱抵抗が温度上昇に与える影響の解明

測定された界面熱抵抗をパラメータとして用いて有限要素法シミュレーションで次世代ロジック半導体の温度上昇が計算された。具体的には、IRDS による次世代ロジック半導体における用いられる配線構造を使用し、温度とサイズ依存性を考慮した配線の抵抗率、ビアの影響を考慮した層間絶縁膜の熱伝導率、配線において電流密度、パッケージの熱抵抗などのパラメータだけでなく、従来の研究では全く考慮されていなかった配線層と層間絶縁膜の界面熱抵抗を重要なパラメータとして使用して有限要素法シミュレーションを行った。

## 4. 研究成果

図 2a には、Ru/TiN/SiO<sub>2</sub> 及び Ru/TaN/SiO<sub>2</sub> 積層構造において、中間層である TiN や TaN の窒素含有量の増加に伴い、界面熱抵抗が減少する傾向が示されている。これは、窒素含有量の増加による隣の界面の結合強度の向上に起因すると考えられる。

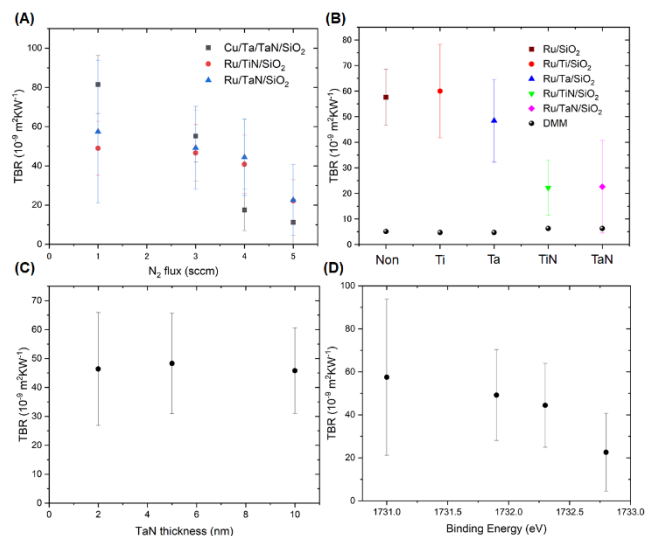


図 2 (a) 中間層である TiN や TaN の窒素含有量の増加に伴い、Ru/中間層/SiO<sub>2</sub> の界面熱抵抗の変化。(b) 異なる中間層を使用した Ru/中間層/SiO<sub>2</sub> 積層構造の界面熱抵抗の変化。(c) 厚さの異なる TaN 中間層を使用した Ru/TaN/SiO<sub>2</sub> 積層構造の界面熱抵抗の変化。(d) Ta 3d の結合エネルギーと界面熱抵抗の関係

これは、窒素含有量の増加による隣の界面の結合強度の向上に起因すると考えられる。

図 2b には、異なる中間層を使用した Ru/中間層/SiO<sub>2</sub> 積層構造における界面熱抵抗の実測値と DMM による予測値が示されている。実測値は DMM による予測値よりもはるかに高いことが明確に分かった。DMM では界面特性の影響（例：界面結合）が考慮されていないため、界面熱抵抗が過小評価されていることが示唆されている。また、中間層として金属よりも窒化物を使用すると界面熱抵抗が低減する効果がより良いことが分かった。図 2c には、厚さの異なる TaN 中間層を使用した Ru/TaN/SiO<sub>2</sub> 積層構造において、顕著な界面熱抵抗の差が観察されなかった。

図 3a には、Ar/N<sub>2</sub> 混合ガスの組成比を変化させて成膜された Ta/TaN/SiO<sub>2</sub> サンプルの Ta 3d の XPS スペクトルが示されている。ピークの分離によって各ピークの成分が確認された。図 3c に示されるように、組成比が 19:1 の場合、1730.9、1733.1 および 1735.4 eV にそれぞれ位置する 3 つのピークが金属 Ta、TaN および TaO<sub>x</sub>、Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> であることが確認された。図 3a に示されるように、組成比が 19:1 から 15:5 に変化するにつれて、Ta 3d ピークの位置が高い結合エネルギー側にシフトするのが明確に観察された。図 3b には、Ta の結合エネルギーが N<sub>2</sub> 流量に対する線形関係が示されている。N<sub>2</sub> フラックスが大きくなると、ピークはより高い結合エネルギーにシフトする。Ta のピークシフトは、窒素化プロセスにおける金属から窒化物への化学状態の変化に起因すると考えられる。図 2d には、Ta 3d の結合エネルギーが増加するにつれて界面熱抵抗が減少する傾向が示されている。Ta 3d ピークだけでなく、Ta 4f ピークにもピークシフトが観察された。Ta 3d および Ta 4f ピークのシフトは、窒素化プロセスにおける TaN 膜の窒素含有量の増加による Ta から N への電荷移動に起因すると考えられる。N の電気陰性度が Ta よりも高いため、結合されるときに Ta の電子が N に引かれ、Ta の結合エネルギーが増加する。N 含有量の増加により、Ta-N 結合の数が増加し、Ta/TaN 界面の結合強度が向上し、Ta/TaN の界面熱抵抗が低下すると考えられる。

図 4a には、Ar/N<sub>2</sub> 混合ガスの流量比を変化させて成膜された Ru/TaN/SiO<sub>2</sub> サン

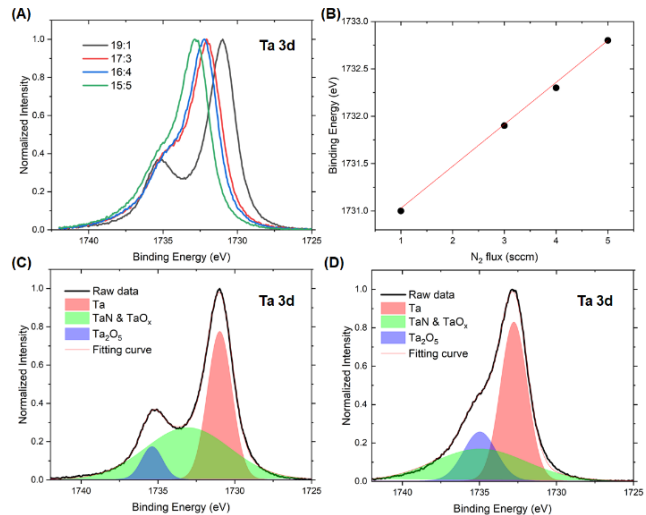


図 3 (a) Ar/N<sub>2</sub> 混合ガスの組成比を変化させて成膜された Ta/TaN/SiO<sub>2</sub> サンプルの Ta 3d の XPS スペクトル (b) 金属 Ta ピークの結合エネルギーと N<sub>2</sub> の流量の間の線形関係 (c) Ar/N<sub>2</sub> 混合ガスの流量比が 19:1 と (d) 15:5 の場合ピークの分離によって各ピークの成分

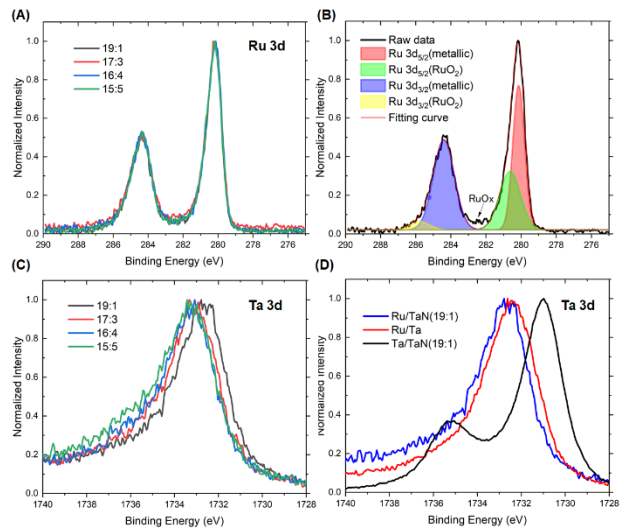


図 4 (a) Ar/N<sub>2</sub> 混合ガスの流量比を変化させて成膜されたサンプルの Ru 3d の XPS スペクトル (b) Ru 3d ピークの分離によって各ピークの成分 (c) Ar/N<sub>2</sub> 混合ガスの流量比を変化させて成膜された Ru/TaN/SiO<sub>2</sub> サンプルの Ta 3d の XPS スペクトル (d) Ru/TaN/SiO<sub>2</sub>、Ru/Ta/SiO<sub>2</sub>、Ta/TaN/SiO<sub>2</sub> サンプルの Ta 3d の XPS スペクトルの比較

プルの Ru 3d の XPS スペクトルが示されている。ピークの分離によって4つのピークが確認され、Ru 3d<sub>5/2</sub> の Ru (280.1 eV) と RuO<sub>2</sub> (280.63 eV)、および Ru 3d<sub>3/2</sub> の Ru (284.4 eV) と RuO<sub>2</sub> (285.8 eV) に対応する。281.8 eV~283.3 eV の領域のスペクトルはうまく分離されず、他の Ru 亜酸化物ピーク (RuO<sub>x</sub>) に起因すると考えられる。Ta/TaN/SiO<sub>2</sub> および Ru/TaN/SiO<sub>2</sub> サンプルの Ta スペクトルを比較すると、図 4b に示されているように、Ru 3d のピークにはピークシフトが見られません。これは、Ru の電子特性が TaN 層によってほとんど影響を受けず、Ru と TaN 層の界面結合が TaN 層内の N 含有量の増加によっても影響を受けなかったことが示唆されている。

図 5a には、11 nm テクノロジーノード用 Ru 多層配線のシミュレーションユニットセルとその温度プロファイルが示されている。この配線は、ローカル層 (M1)、中間層 (M2~M9)、およびグローバル層 (M10~M14) を含む 14 層の直交マルチレベル構造を持つ。温度プロファイルから、グローバル層配線の温度上昇 ( $\Delta T_{max}$ ) が中間層およびローカル配線よりもはるかに高いことが明確にわかった。これは、放熱経路が長くなるほど温度上昇が高くなることが示唆されている。図 5b には、異なる Ar/N<sub>2</sub> ガス流量比で成膜された TaN 層を有する Ru/TaN/SiO<sub>2</sub> 配線構造の  $\Delta T_{max}$  がテクノロジーノードに対して示されている。図 5c には、異なる中間層を有する Ru/中間層/SiO<sub>2</sub> 配線構造の  $\Delta T_{max}$  がテクノロジーノードに対して示されている。テクノロジーノードが 45 nm から 11 nm に縮小するにつれて、Ru 配線の抵抗率は 8.1 から 9.5  $\mu\Omega\text{cm}$  に増加し、最大電流密度は 3.0 から 9.5 MA/cm<sup>2</sup> に増加する。電流の実効値の二乗と配線抵抗の積である配線全体の電力消費が大幅に増加し、 $\Delta T_{max}$  の増加を引き起こす。図 5d には、11 nm テクノロジーノードにおける配線の界面熱抵抗に対する  $\Delta T_{max}$  が示されている。配線の界面熱抵抗が高いほど、配線の  $\Delta T_{max}$  が高くなる。フィッティング曲線を外挿することで、界面熱抵抗を 5 m<sup>2</sup>K/GW 以下に減少させることができれば、グローバル層配線の  $\Delta T_{max}$  を 300K 以下に抑えることができることが示されている。したがって、配線の温度上昇には界面熱抵抗が重要な役割を果たしており、熱マネジメントのためには界面熱抵抗を低減する必要がある。

本研究では、金属配線と層間絶縁膜の界面結合が配線の界面熱抵抗の決定要因であり、界面熱抵抗を低減するために最適化する必要があることが示されている。TaN 膜における窒素含有量を増やすことで、TaN 膜に隣接する界面の界面熱抵抗が低減され、配線の熱マネジメントに有利であることが示された。しかしながら、TaN 膜の微細構造の変化により TaN 膜の電気抵抗も増加し、より多くのジュール熱が発生する。配線の熱マネジメントを最適化するためには、界面熱抵抗の低減と電気抵抗の間でトレードオフを行う必要がある。

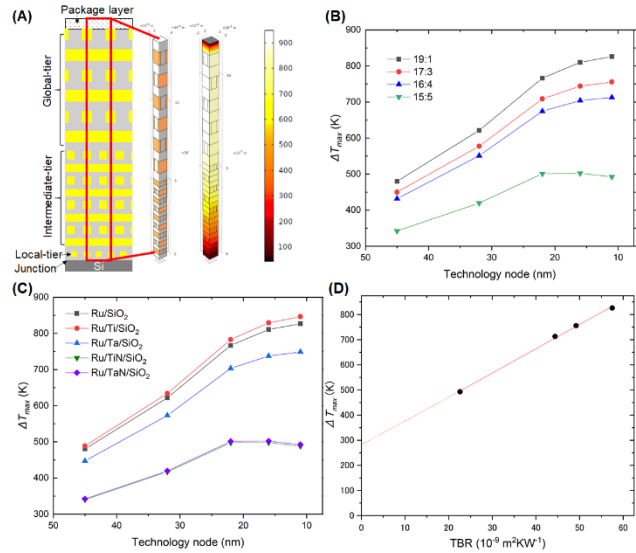


図 5 (a) 11 nm テクノロジーノード用 Ru 多層配線のシミュレーションユニットセルとその温度プロファイル (b) テクノロジーノードに対する異なる Ar/N<sub>2</sub> ガス流量比で成膜された TaN 層を有する Ru/TaN/SiO<sub>2</sub> 配線構造の  $\Delta T_{max}$  (c) テクノロジーノードに対する異なる中間層を有する Ru/中間層/SiO<sub>2</sub> 配線構造の  $\Delta T_{max}$  (d) 11 nm テクノロジーノードにおける配線の界面熱抵抗に対する  $\Delta T_{max}$

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Zhan Tianzhuo, Sahara Keita, Takeuchi Haruki, Yokogawa Ryo, Oda Kaito, Jin Zhicheng, Deng Shikang, Tomita Motohiro, Wu Yen-Ju, Xu Yibin, Matsuki Takeo, Wang Haidong, Song Mengjie, Guan Sujun, Ogura Atsushi, Watanabe Takanobu	4. 巻 14
2. 論文標題 Modification and Characterization of Interfacial Bonding for Thermal Management of Ruthenium Interconnects in Next-Generation Very-Large-Scale Integration Circuits	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 7392 ~ 7404
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.1c20366	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Zhan Tianzhuo, Xu Mao, Cao Zhi, Zheng Chong, Kurita Hiroki, Narita Fumio, Wu Yen-Ju, Xu Yibin, Wang Haidong, Song Mengjie, Wang Wei, Zhou Yanguang, Liu Xuqing, Shi Yu, Jia Yu, Guan Sujun, Hanajiri Tatsuro, Maekawa Toru, Okino Akitoshi, Watanabe Takanobu	4. 巻 14
2. 論文標題 Effects of Thermal Boundary Resistance on Thermal Management of Gallium-Nitride-Based Semiconductor Devices: A Review	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Micromachines	6. 最初と最後の頁 2076 ~ 2076
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/mi14112076	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 4件/うち国際学会 6件）

1. 発表者名 Tianzhuo Zhan
2. 発表標題 Effect of thermal boundary resistance on thermal management of interconnects in logic chips
3. 学会等名 3rd International Conference on Materials Science & Nanotechnology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tianzhuo Zhan
2. 発表標題 Thermal Boundary Resistance of Ruthenium Interconnects in Next Generation VLSI
3. 学会等名 The 13th Asian Thermophysical Properties Conference (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Tianzhuo Zhan
2. 発表標題 Modification of interface between the interconnect and dielectric layers for thermal management of VLSI interconnects
3. 学会等名 Advances in Surfaces, Interfaces, and Interphases 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Zhan Tianzhuo
2. 発表標題 Modification of thermal boundary resistance for thermal management of interconnect system in advanced VLSI circuits circuits
3. 学会等名 The 18th International Symposium on Bioscience and Nanotechnology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Tianzhuo Zhan
2. 発表標題 Thermal Management of Interconnects in Logic Semiconductors
3. 学会等名 Materials Science and Engineering 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Tianzhuo Zhan
2. 発表標題 Effect of Nanoscale Thermal Transport on Thermal Management of Interconnects in Deeply Scaled VLSI
3. 学会等名 2nd Global Summit on Nanotechnology and Materials Science GSNMS 2023 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------