

微电子材料化学机械平坦化加工中的材料去除率模型

*严 波¹, 张晓敏¹, 吕 欣²

(1. 重庆大学工程力学系, 重庆 400044; 2. 重庆大学土木工程学院, 重庆 400044)

摘 要: 采用有限元数值方法分析微电子材料化学机械平坦化(CMP)工艺过程中材料的变形和去除机理, 得到作用在磨料颗粒上的力与名义压力、磨粒含量以及垫板几何和力学特性之间的关系, 进而建立起一个材料去除率(MRR)模型。利用该模型预测得到的材料去除率与悬浮液中磨料颗粒含量以及压力间的关系与已有的实验结果相吻合, 合理解释了实验观察到的现象。

关键词: 化学机械平坦化(CMP); 材料去除率(MRR); 数值模拟; 微电子材料; 集成电路

中图分类号: TG301 **文献标识码:** A

A MODEL OF MATERIAL REMOVAL RATE DURING CHEMICAL MECHANICAL PLANARIZATION OF MICROELECTRONIC MATERIALS

*YAN Bo¹, ZHANG Xiao-min¹, LU Xin²

(1. Department of Engineering Mechanics, Chongqing 400044, China; 2. College of Civil Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China)

Abstract: The deformation of materials and material removal mechanism during chemical mechanical planarization (CMP) processing of microelectronic materials are numerically analyzed using finite element method. The dependence of force acting on particles during CMP on nominal pressure, particle concentration and characteristics of pad is determined. With the force acting on particles, a material removal rate (MRR) model is proposed. The results predicted with the model are in good agreement with the available experimental results.

Key words: chemical mechanical planarization (CMP); material removal rate (MRR); numerical simulation; microelectronic materials; integrated/circuit

1 引言

集成电路制造中, 使用金属布线或构成元器件的多晶硅和扩散层等将元器件连接起来。在超大规模集成电路中, 随着元器件数目的增加, 只靠多晶硅、扩散层和金属布线来完成所有元器件间的连接, 将使芯片的尺寸增加, 且布线引起的延迟时间增长, 导致运算速度降低。为了解决这一问题, 通

常采用多层布线结构。然而, 在形成多层布线的工艺过程中, 由于布线层表面的凹凸不平, 越是处于上层的布线层, 层间绝缘膜和金属膜表面的凹凸程度越大, 极难形成性能稳定的精细布线。为此, 必须采用晶片表面平坦化的技术。化学机械平坦化(CMP: Chemical Mechanical Planarization)技术由于对加工表面优越的整体平坦化能力, 而成为最有前

收稿日期: 2003-01-10; 修改日期: 2003-06-14

基金项目: 重庆大学骨干教师资助计划项目

作者简介: *严 波(1965), 男, 重庆人, 副教授, 博士, 主要从事固体力学和工程力学研究(E-mail: boyan@cqu.edu.cn);

张晓敏(1974), 男, 重庆人, 讲师, 硕士, 主要从事固体力学研究;

吕 欣(1967), 女, 重庆人, 讲师, 主要从事工程力学研究

途的超大规模集成电路金属化层的平坦化技术^[1],是下一代芯片布线和互连中的关键技术。

目前,对 CMP 技术在微电子材料平坦化过程中的机理尚缺乏根本性的认识,应用中尚处于通过“试验-修正”过程确定工艺参数的阶段,难以设计和控制工艺参数获得理想的平坦化效果,达到更多层布线的要求。因此,对这一问题的基础研究具有重要的意义。

材料去除率是控制表面平坦度的重要指标。Preston 在研究玻璃的抛光问题时最早提出了一个材料去除率模型^[2],该模型认为材料在抛光过程中切削厚度的变化率与压力和抛光材料和磨具之间的相对速度的乘积成正比。文[3]和[4]对 Preston 模型进行了修正,提出材料去除率与压力的 5/6 次方和速度的 1/2 次方成正比。文[5]给出了一个与压力的 2/3 次方成正比的 MRR 模型,并提出了压力门槛值的概念。尽管这些模型与某些实验结果吻合,但尚不能解释另外一些实验数据^[6,7]反映出的 MRR 与压力和颗粒含量间关系曲线的分段现象,文[5]中压力门槛值的提出也缺乏合理的物理解释。

事实上,在 CMP 过程中,加工晶片(wafer)与垫板(pad)可能存在接触和非接触两种状态。非接触状态可能出现在磨料颗粒含量较高、垫板较硬或压力很低的情况,此时施加在垫板上的所有载荷均通过磨料颗粒传递到晶片上。而接触状态则出现在颗粒含量较低、垫板柔软或高压力的情况,此时磨料颗粒传递的力仅为总载荷的一部分,另一部分则通过垫板与晶片的接触面传递。垫板和晶片从非接触状态到接触状态的转变可能是引起 MRR 曲线分段的原因。

本文通过数值模拟,分析磨料颗粒含量和压力大小等在控制垫板和晶片接触与非接触两种机制方面的作用。并在此基础上给出一个材料去除率模型,合理解释了压力门槛值出现的原因。用该模型预测的结果与文[6,7,8]的实验结果相吻合。

2 分析模型的建立

研究表明,垫板的非线性力学行为在 CMP 工艺过程中具有重要的作用。选择“Thomas West P318”垫板作为研究对象,其为一种泡沫胶(elastomeric foam)材料,这种材料有别于一般的超弹性材料,其具有很大的可压缩性。由数值图像分析得到该垫板的空隙率 b 为 10%。垫板的力学性能

测试采用一组 $10 \times 10 \times 2\text{mm}$ 的试样,试验在 Instron 材料试验机上完成。得到的压缩名义应力和名义应变曲线如图 1 中所示。

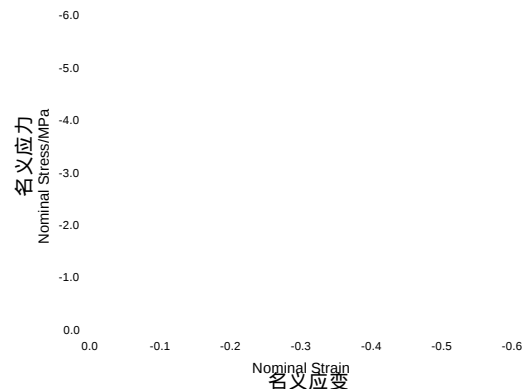


图 1 “ThomasWest P318”垫板压缩名义应力-应变曲线

Fig.1 Curve of nominal stress vs nominal strain of

“ThomasWest P318” pad

在 CMP 工艺过程中,磨料颗粒对晶片表面材料去除的机制十分复杂。磨料颗粒有不同的形状,其中使用较多的近似为球状体。这种磨料颗粒在 CMP 加工过程中不断地作平动和滚动,通过摩擦和切削去除材料。以往的研究表明,作用在单个磨料颗粒上的力的大小是决定 MRR 的最重要的因素之一,因此力大小的确定是关键。由于难以理论模拟真实的过程,作为简化,在此采用有限元方法通过分析类似于压痕问题以确定作用在磨料颗粒上的力的大小。

模型中假设悬浮液(slurry)中的磨料颗粒为具有相同直径的球体;在加工过程中仅处在垫板突起部分的磨粒才起作用,即仅这些磨粒具有切削作用;垫板和晶片之间的磨粒均匀分布。在这些假设下,磨粒的体积含量可表达为(参见图 2)

$$a = \frac{4}{3} p \left(\frac{d}{2}\right)^3 = \frac{p}{6} \left(\frac{d}{L}\right)^2 \quad (1)$$

这里 L 是两相邻磨粒之间的距离, d 是每个磨粒的直径。据此,可建立一个轴对称模型,如图 3 所示。轴对称模型的等效直径 L' 可这样确定,即等效的轴对称区域和原矩形区域承受相等的力。因此,模型中晶片的上表面和垫板的下表面面积和原矩形面积相等,

$$p \left(\frac{L'}{2}\right)^2 = L^2, \quad L' = \frac{2}{p} L \quad (2)$$

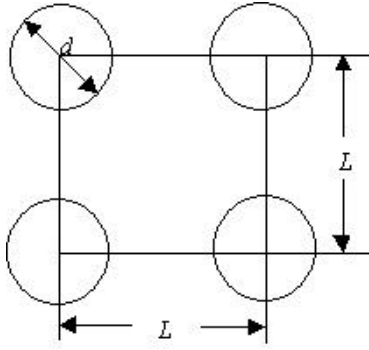


图2 磨料颗粒体积含量定义示意图

Fig.2 Definition of volume fraction of particles

作用在晶片上表面的总的力为

$$F_t = p \left(\frac{L'}{2} \right)^2 p = L^2 p = \frac{p d^2}{6a} p \quad (3)$$

式中 p 为作用在晶片表面的压力, 并利用了关系(1)。值得注意的是, 此处的压力为局部压力, 其与宏观压力之间有如下关系

$$p = \frac{A_0}{A_s} p_0 \quad (4)$$

这里 A_0 和 A_s 分别为垫板表面的总面积和突起部分的总面积, $A_s = (1-b)A_0$, 见图4。将式(4)代入(3), 有

$$F_t = \frac{A_0 p d^2}{A_s 6a} p_0 \quad (5)$$

显然, 在晶片与垫板处于非接触状态时, 作用在磨粒上的力等于作用在晶片表面上总的载荷, 但在晶片和垫板处于接触状态时, 总的载荷则由磨粒和晶片与垫板间的接触区域共同承担。

3 有限元计算及结果

有限元模型的网格划分参见图5。分析中采用4节点四边形单元, 定义3个接触面, 即磨粒-晶片接触面, 磨粒-垫板接触面和晶片-垫板接触面。忽略各接触面间的摩擦。由于垫板会发生很大的变形, 在磨粒与垫板接触区域附近的垫板应用自适应方案。垫板为泡沫胶材料, 其单轴响应由实验给出, 如图1。其初始弹性模量为 $E_0 = 12.9\text{MPa}$, 密度为 $\rho \approx 544.6\text{kg/m}^3$, Poisson 比 $\nu \approx 0.15$ 。视晶片为弹性材料, $E = 193\text{GPa}$, $\nu = 0.3$, $\rho = 8030\text{kg/m}^3$, 考虑到加工过程中化学侵蚀对晶片表面的弱化作用, 视晶片表层为弹塑性材料, $E = 19.3\text{GPa}$, 屈服应力 $s_y = 441\text{MPa}$ [9]。由于磨料颗粒较硬, 忽略其变形, 视为刚体。

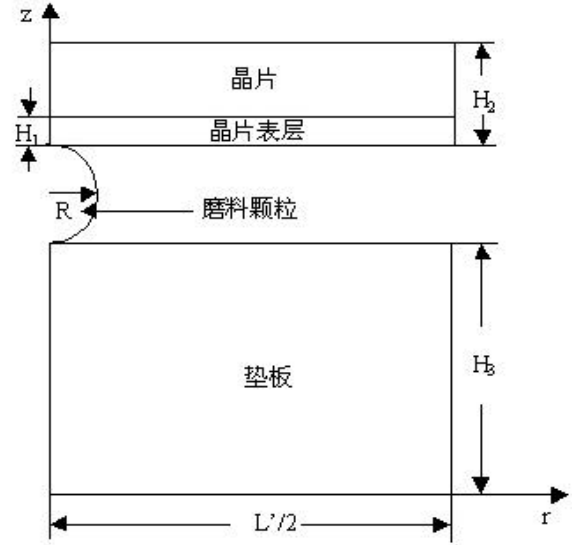


图3 轴对称模型

Fig.3 Axi symmetric model

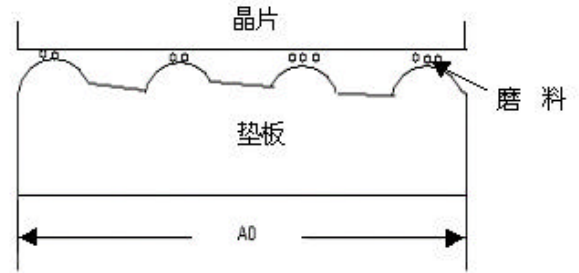


图4 晶片与垫板突起部分的接触示意图

Fig.4 Contact between wafer and pad

针对大多数情况, 取磨粒的直径 d 在 $50\text{-}200\text{nm}$ 之间, 模型尺寸 L' 在 $500\text{-}2000\text{nm}$ 之间变化。其它几何参数如表1中所列。 H_1 为晶片表层厚度, H_2 为晶片厚度。保持模型尺寸改变磨粒的直径或保持磨粒直径而改变模型尺寸都对应于悬浮液中磨粒含量的改变。所分析模型的磨料颗粒体积含量变化范围为 0.67% 到 2.67% 。所有模型中垫板的厚度 H_3 均取 400nm , 此足以消除接触区与远处的相互影响。通过在晶片表面给定位移 d 施加载荷。

垫板对分配在磨粒上的力 F_p 的影响可通过磨粒周围垫板与晶片未接触区域的几何特征尺度 l 表征, 参见图5。 l 的上限为 $L'/2$, 其相应于晶片与垫板未接触的情况; 下限为 $d/2$, 相应于当垫板极其柔软或压力很高时的极限情况。根据有限元计算结果, 得到变量 l/d 随 p/E_0 的变化关系曲线如图6所示, 对这些曲线进行拟合后可得

$$\frac{l}{d} = a \left(\frac{p}{E_0} \right)^n \quad (6)$$

a 和 n 分别为比例系数和指数, E_0 为垫板的初始弹性模量。有趣的是, a 和 n 几乎与磨粒的大小和含量无关, 其取值分别为 $a=0.55$, 和 $n=-0.42$, 所有曲线均近似趋于同一条曲线。当垫板和晶片刚好接触时, $l = L'/2$, $p = p_{cr}$, 由式(6)有

$$\frac{L'}{2d} = a \left(\frac{p_{cr}}{E_0} \right)^n \quad (7)$$

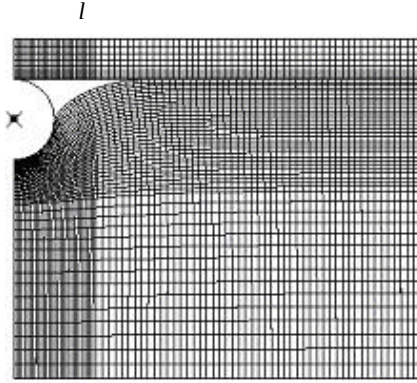


图5 模型网格划分与变形图(节点数 4374, 单元数 4240)
磨粒直径 $d=100\text{nm}$, 磨粒体积含量 $a=0.67\%$

Fig.5 Mesh and deformation of FEM model

表1 有限元模型几何参数

Table 1 Geometric parameters of FEM model

编号	d (nm)	a	L' (nm)	H_1 (nm)	H_2 (nm)	H_3 (nm)	d (nm)
1	50	0.67%	500	10	50	400	80
2	100	0.67%	1000	10	50	400	130
3	150	0.67%	1500	10	50	400	180
4	200	0.67%	2000	10	50	400	240
5	100	0.67%	1000	10	50	400	130
6	100	1.04%	800	10	50	400	130
7	100	1.85%	600	10	50	400	130
8	100	2.67%	500	10	50	400	130

称 p_{cr} 为临界压力。结合方程(6)和(7), 并考虑(1)和(2), 得到

$$l = \frac{L'}{2} \left(\frac{p}{p_{cr}} \right)^n = \frac{d}{6a} \left(\frac{p}{p_{cr}} \right)^n \quad (8)$$

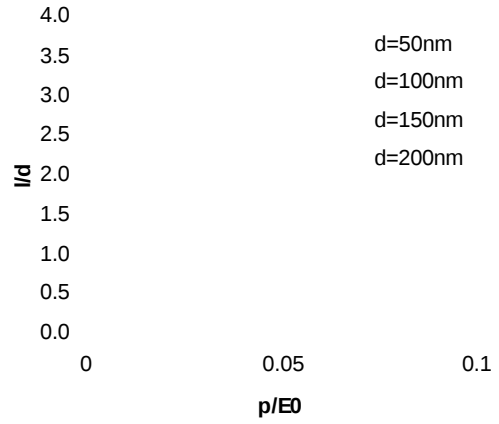
由方程(7), 可得到临界压力

$$P_{cr} = E_0 \left(\frac{1}{6a} \right)^{\frac{1}{n}} \quad (9)$$

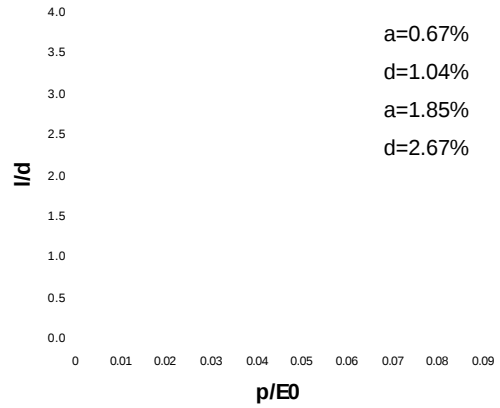
这里的临界压力可理解为文[5]给出的压力门槛值。图7所示为模型中反作用力的分配关系。图中曲线1为垫板下表面反力随半径的变化, 曲线2为垫板和晶片间的接触力, 曲线3为磨粒与垫板或

晶片间的相互作用力。根据计算结果, 可将传递到磨粒上的力表达为

$$F_p = cp l^2 p \quad (10)$$



(a) 磨粒体积含量 $a=0.67\%$



(b) 磨粒直径 $d=100\text{nm}$

图6 l/d 与 p/E_0 之间的关系

Fig.6 Curves of l/d vs p/E_0

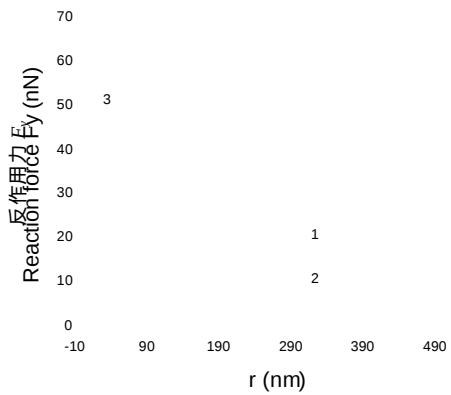
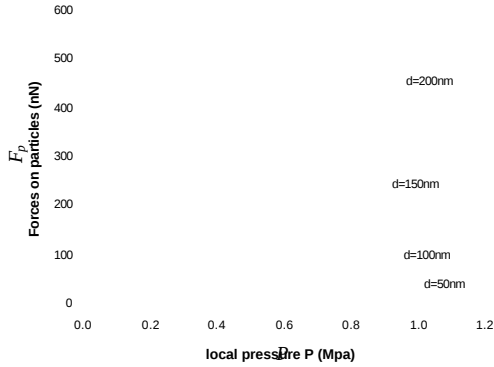


图7 反作用力随半径的变化

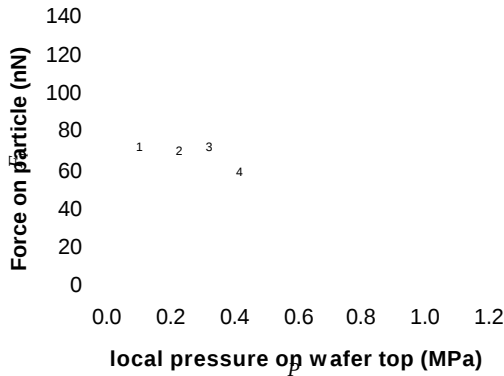
Fig.7 Variation of reactions against particle diameter
其中系数 $c=1.55$ 。结合(8)和(10), 有

$$F_p = cp \frac{d^2}{6a} \left(\frac{p}{p_{cr}} \right)^{2n} p = \frac{cp}{6a} \frac{d^2}{p_{cr}^{2n}} p^{1+2n} \quad (11)$$

由式(11)预测的结果与有限元计算结果之间的比较见图 8。



(a) 磨粒体积含量 $\alpha = 0.67\%$



(b) 磨粒直径 $d=100\text{nm}$

(1: $\alpha=0.67\%$; 2: $\alpha=1.04\%$; 3: $\alpha=1.85\%$; 4: $\alpha=2.67\%$)

图 8 式(11)预测反力与有限元结果的比较

Fig.8 Comparison of FEM results and those by formula (11)

4 MRR 模型

得到作用在磨料颗粒上的力后，材料去除率 (MRR)可由下式确定^[10]

$$\frac{dV}{dt} = N \cdot A' \cdot \frac{dH}{dt} = \frac{2N}{d} \left(\frac{F_p}{s_y} \right)^2 \cdot v \quad (12)$$

这里 N 是处于垫板突起区域的磨料颗粒数， v 为垫板上某点相对于晶片的速度， A' 则是磨粒在晶片上刮过的面积， s_y 为晶片表层的屈服应力。用切削材料厚度定义的 MRR 为

$$\frac{dH}{dt} = \frac{2N}{A_0 d} \left(\frac{F_p}{s_y} \right)^2 \cdot v \quad (13)$$

假设处在垫板突起区域的磨粒含量与其它位置的悬浮液中的含量相同，则

$$a = \frac{V_p}{V} = \frac{N \cdot \frac{4}{3} \pi \left(\frac{d}{2} \right)^3}{A_s d} \quad (14)$$

由此可知处于垫板突起区域的磨粒数可由下式确定

$$N = \frac{6A_s a}{p d^2} \quad (15)$$

将(3)和(11)代入(13)并利用(4)和(15)，得到如下关系

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \frac{2A_0 p}{3A_s a} \left(\frac{p_0}{s_y} \right)^2 \cdot v, \quad p_0 \leq p_{cr0} \\ \frac{dH}{dt} &= 2 \left(\frac{c}{s_y} \right)^2 \left(\frac{A_s}{A_0} \right)^{3n+1} \\ &\quad \cdot \frac{p}{6a} \frac{1}{p_{cr0}^{3n}} p^{2+3n} \cdot v, \quad p_0 > p_{cr0} \end{aligned} \quad (16)$$

这里利用了

$$p_{cr0} = \frac{A_s}{A_0} p_{cr} \quad (17)$$

由此可见，MMR 具有两个区域，分别对应于晶片与垫板的接触和非接触两种状态。

5 与实验结果的比较及结论

本文理论预测模型与 Ouma^[6]的实验结果的比较见图 9。该实验结果表明，MRR 与压力和速度的乘积的关系曲线分为两段，可理解为其分别对应于垫板和晶片的非接触和接触两种状态。这里重点讨论磨粒含量和压力对 MRR 的影响，由于难以获得模型预测所需的所有参数，故通过一个实验点数据

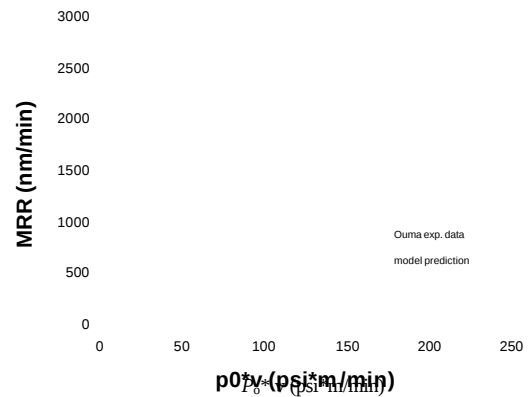


图 9 模型预测与实验结果的比较(Ouma, 1998)

Fig.9 Comparison of predicted and experimental results (Ouma, 1998)

进行标定,从而记入未知参数的影响,考察曲线的变化趋势。从图 9 可见,理论预测与 Ouma 的实验结果吻合较好,反映了临界压力的存在。

如前所述, MRR 还与悬浮液中磨粒的含量有关。由本文建立的模型可知,在垫板和晶片无接触的情况下, MRR 随磨粒含量增加而减小,而在垫板和晶片接触的情况下, MRR 却随磨粒含量增加而增大。模型预测结果与 Lou 等^[7]的实验结果的比较如图 10 中所示。实验结果呈递增趋势,这可理解为垫板和晶片处于接触状态。同样,为了消除未知参数的影响,利用了一个实验点进行标定。

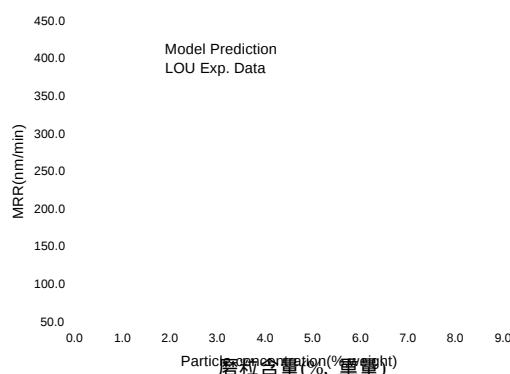


图 10 模型预测与实验结果的比较(Lou, 1998)

Fig.10 Comparison of predicted and experimental results (Lou, 1998)

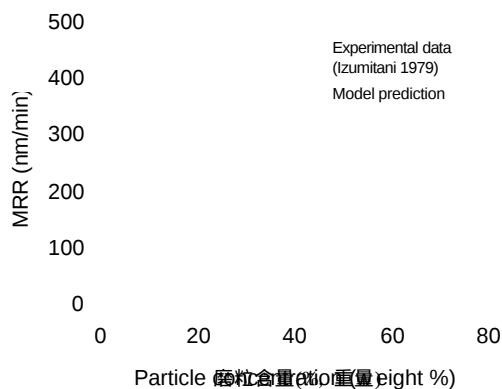


图 11 模型预测与实验结果的比较

Fig.11 Comparison of predicted and experimental results (Izumitani, 1979)

在相同的压力作用下,当磨粒含量较高,垫板和晶片不能相互接触,但当磨粒含量较低时,垫板和晶片可能接触。Izumitani^[8]的实验结果表明,在相同的压力作用下,当磨粒含量较低时 MRR 随磨粒含量增加而增大;当磨粒含量较高时, MRR 随

磨粒含量增加而减小。模型预测与 Izumitani 的实验结果的比较见图 11。理论预测时仍利用了一个实验点进行标定。从结果的比较可见,虽然模型预测基本反映了实验结果的变化趋势,但数值结果存在较大的误差。这可能是由于实验条件的影响所致。

综上所述,在机械化学平坦化加工过程中,垫板的非线性力学性能具有重要的作用。对于采用“软”垫板的 CMP 工艺,不能像通常一样将垫板视为线性材料。其几何非线性特性,使其在较低的压力作用下与晶片表面接触,重新分配作用在磨粒上的力,进而影响材料的去除机制。本文通过数值模拟结果建立得到的 MRR 模型,合理解释了由实验得到的 MRR 与压力和磨粒颗粒含量关系曲线的分段特性,由模型预测得到的数值结果与实验结果吻合较好。

参考文献:

- [1] Steigerwald J M, Murarka S P, et al. Investigation of the chemical mechanical polishing of copper thin films to form in-laid interconnections in the dielectric (SiO_2) films[M]. Proceedings of the 11th Biennial Soc Inc, Pennington, NJ, USA, 1997. 761-766.
- [2] Preston F W. The theory and design of plate glass polishing machine[J]. J. Soc. Glass Tech.[J], 1927, 11(44): 214-256.
- [3] Wang D, Lee J, Holland K, Bibby T, Beaudoin S and Cale T. Von mises stress in chemical mechanical polishing processes[J]. J. Electrochem. Soc, 1997, 144(3): 1121-1127.
- [4] Tseng W T, Chin J H, Kang L C. A comparative study on the roles of velocity in the material removal rate during chemical mechanical polishing[J]. J. Electrochemical Soc., 1999, 146(5): 1952-1959.
- [5] Zhao, B and Shi F G. Chemical mechanical polishing in IC processes: new fundamental insights[J]. Int. J. CMP, 2000, 1(1): 13-25.
- [6] Ouma D O. Modeling of chemical mechanical polishing for dielectric planarization[D]. Massachusetts Institute of Technology, Dept. Electrical Engineering and Computer Science, Ph.D. Thesis, 1998.
- [7] Izumitani T. Polishing lapping and diamond grinding of optical glasses, Treatise on Materials Science and Technology (eds. M. Tomozawa and R. H. Doremus) [M]. Academic Press, New York, 1979, 17: 115-172.
- [8] Luo Q, Ramarajan S and Babu S V. Modification of the Preston equation for the chemical-mechanical polishing of copper[J]. Thin Solid Films, 1998, 335: 160-167.
- [9] Srinivasa-Murthy C, Wang D, Beaudoin SP, et al. Stress distribution of chemical mechanical polishing[J]. Thin Solid Films, 1997, 308: 533-537.
- [10] Fu G, Chandra A, Guha S and Subhash G. A plasticity based model of material removal in chemical mechanical polishing (CMP)[M]. IEEE Trans. Semicon. Mfg., 2001, 14(4): 406-417.