

粘着力对化学机械抛光芯片分子去除机理影响的数学模型^{*}

王永光 赵永武[†]

(江南大学机械工程学院, 无锡 214122)

摘要: 基于芯片/磨粒/抛光垫的微观接触力平衡关系,建立了考虑抛光垫/磨粒大变形和粘着力效应的微观接触模型.模型预测结果表明:对于 Cu 和 SiO₂ 芯片而言,粘着力对磨粒所受外力具有重要影响作用;考虑粘着力的情况下,单个磨粒压入芯片的深度比未考虑粘着效应时,最大为原来的 2 倍和 4 倍.然而,即使考虑粘着效应时,磨粒压入芯片的深度仍然在分子量级.因此,认为 CMP 材料的去除机理为单分子层去除机理.为深入研究 CMP 材料原子/分子去除机理提供了一定的理论指导.

关键词: 化学机械抛光; 粘着力; 分子去除机理; 模型

EEACC: 2550E; 2570

中图分类号: TN305.2

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2007)12-2018-05

1 引言

随着集成电路特征尺寸的减小和结构层数的增加,化学机械抛光(CMP)技术已经成为实现集成电路跨入 0.05 μm 的关键技术和工艺^[1].而对该工艺的精确控制很大程度上取决于对其材料去除机理的认识^[2~5].

抛光垫/单个磨粒/芯片的微观接触,对于揭示 CMP 材料的微观去除机理具有重要作用^[6].CMP 磨粒的直径一般为纳米量级,在磨粒与芯片、抛光垫的接触模型中,如果忽略了分子间作用力的影响,必然会使模型的计算结果产生很大的误差. Burtovyy 等人^[7]的研究表明:粘着力对 CMP 中单个磨粒所受外力具有重要的影响作用,然而,该学者并未建立数学模型. Zhang 等人^[8]通过数学模型解释了硬质抛光垫条件下,粘着效应对磨粒压入芯片深度的影响.然而,对于软质抛光垫而言,磨粒和抛光垫为大变形接触,即磨粒几乎全部压入抛光垫,因此小变形的 Hertz 模型无法解释该过程.目前对软质抛光垫的粘着效应模型尚无相关报道.

CMP 芯片去除机理主要是 Kaufman 等人^[9]提出的氧化-去除-再氧化的磨粒磨损去除机理.然而, Chang 等人^[10,11]的研究表明:在两个连续磨粒划过

芯片表面之间,芯片表面和氧化剂不足以形成宏观上连续去除的氧化薄膜,即使在芯片表面存在缺陷的情况下^[12],芯片表面的氧化薄膜厚度亦低于分子量级.为此,本文主要考虑大变形条件下,粘着力对磨粒压入芯片表面的影响作用,以期阐述 CMP 材料的微观去除机理.

2 模型建立

Zhao 等人^[13,14]提出了克服表面分子键能的表面原子或分子(原子/分子)氧化磨损机理,认为 CMP 是表面的最外层原子/分子不断氧化和磨损的动态平衡过程.化学作用在于通过氧化反应削弱表面原子/分子的键能,而机械作用是镶嵌磨粒把键能弱化的表面分子磨损掉.当磨粒作用于芯片表面的机械能达到足以破坏原子/分子结合键力,使原子/分子脱离表面时,芯片表面的原子/分子就会发生被去除的情况.如图 1 所示,CMP 中材料原子/分子去除的过程为:

- (1)化学作用将芯片表面的新鲜分子(unreacted)部分氧化成为氧化分子(reacted);
- (2)磨粒将键能弱化的氧化分子去除;
- (3)流动的抛光液将去除的原子/分子带走,露出新鲜表面,继续循环去除.

^{*} 江苏省自然科学基金(批准号: BK2004020),教育部回国人员启动基金(批准号:[2004]527)和清华大学摩擦学国家重点实验室开放基金(批准号: SKLT04-06)资助项目

[†] 通信作者. Email: zhaoyw@sytu.edu.cn

2007-05-30 收到,2007-07-05 定稿

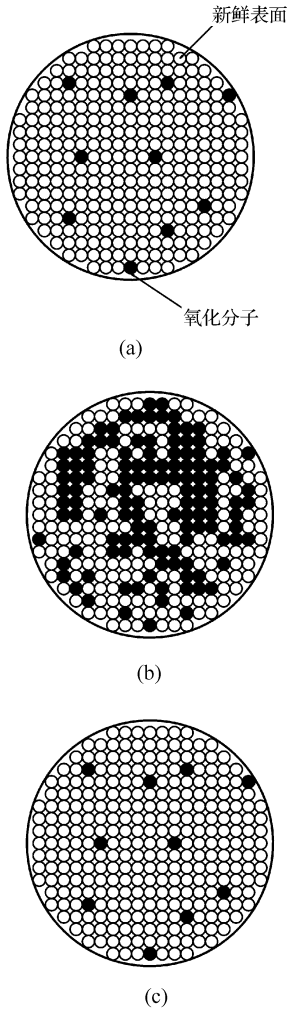


图 1 两个磨粒之间芯片表面氧化膜形成和去除的过程 (a) 第一个磨粒划过表面后;(b)第二个磨粒划过表面之前;(c)第二个磨粒划过表面之后

Fig.1 Schematic diagram showing the formation and removal of the reacted molecules at the surface sites (a) After the action of a particle;(b) Before the action of a second particle;(c) After the action of the second particle

2.1 模型假设

(1)因为抛光垫表面的粗糙度远远大于芯片表面的粗糙度,因此将抛光垫和芯片的接触等效为一个粗糙平面和一个光滑平面的接触;

(2)磨粒的形状为球形;

(3)粘着力仅仅考虑范德华力的作用.

在分析 CMP 材料去除机理的过程中,Zhao 等人^[15,16]采用了类似假设(1)的假设.Luo 等人^[17]的研究表明磨粒的形状对材料去除率的影响较小,为了简明扼要地分析问题,采用假设(2),同时 Bastaninejad 等人^[18,19]也采用了该假设.假设(3)采用了 Zhang 等人^[8]的假设.

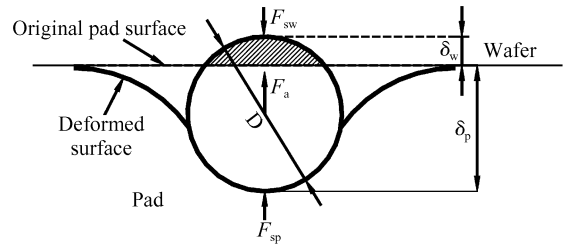


图 2 芯片/磨粒/抛光垫的接触示意图

Fig. 2 Schematic of wafer/single-particle/soft-pad micro-contact

2.2 抛光垫/磨粒/芯片接触

抛光垫/磨粒/芯片接触状态如图 2 所示.

对于软质抛光垫(IC1000)而言,抛光垫和磨粒的接触为大变形接触,即磨粒几乎全部压入抛光垫内.由 Wang 等人^[20]的研究可知,磨粒/抛光垫的接触力 F_{sp} 为:

$$F_{sp} = f(\zeta) E_{sp} R^2 \quad (1)$$

其中 $f(\zeta) = 2^{-1/2} \frac{2\zeta + (\zeta - 1)(-3 + \sqrt{9 + 12\zeta})}{(-3 + \sqrt{9 + 12\zeta})^{1/2}}$, $\zeta = \delta_p / R$; R 为磨粒的半径; δ_p 为磨粒压入抛光垫的深度.考虑芯片弹性模量远远大于抛光垫弹性模量,有 $E_{sp} = E_p / (1 - \nu_p^2)$,其中 E_p 和 ν_p 分别代表抛光垫和芯片的弹性模量和泊松比.

假设磨粒和芯片之间的变形为塑性变形,则磨粒/芯片的接触力 F_{sw} 为:

$$F_{sw} = 2H_w \pi R^2 (2 - \zeta) \quad (2)$$

其中 H_w 为芯片表面的硬度.

由图 2 可知,存在如下几何关系:

$$\delta_w + \delta_p = D = 2R \quad (3)$$

$$\delta_w = (2 - \zeta)R \quad (4)$$

磨粒和芯片表面的粘着力^[21] F_a 为:

$$F_a = \frac{AR}{6d^2} \quad (5)$$

其中 A 为 Hamaker 常数; d 为磨粒和芯片表面的距离.根据 Zhang 等人^[8]的研究可知, d 的范围可近似为 0.2~1.0nm.

2.3 力平衡关系

采用和 Zhao 等人^[15,16]相似的方法,认为磨粒处于力平衡状态,则:

$$F_a + F_{sp} = F_{sw} \quad (6)$$

联立(1),(2)和(6)式知:

$$f(\zeta) E_{sp} R^2 + \frac{AR}{6d^2} = 2H_w \pi R^2 (2 - \zeta) \quad (7)$$

表 1 CMP 模型计算参数

Table1 Parameters adopted in the analysis of CMP model

参数	单位	Cu	SiO ₂
常数 A	10 ⁻²⁰ J	28.4 ^[22]	50 ^[23]
抛光垫 ^[24] E_p	MPa	10	10
ν_p		0.2	0.2
芯片 H_w	GPa	0.8 ^[25]	7.9 ^[17]
磨粒直径 ^[26] $D=2R$	nm	13	13

2.4 方程求解

给定 E_{sp}, H_w, R, d 和 A 的条件下,采用 Newton 迭代法,通过(7)式求得 ζ ,然后通过(4)式求得磨粒压入芯片的深度,通过(2)式求出磨粒所受的合外力.当粘着力 F_a 为 0 时,由(7)式求得磨粒压入芯片的深度 δ'_w ,定义压痕深度增大指数 α 为:

$$\alpha = \frac{\delta_w - \delta'_w}{\delta'_w} \tag{8}$$

粘着力占磨粒所受外力的百分比为:

$$\beta = \frac{F_a}{F_{sw}} \tag{9}$$

3 结果与讨论

考虑到抛光液化学作用对芯片表面硬度的影响,采用表 1 中的参数.将表 1 中的参数代入(8)和(9)式求解,求得磨粒压入芯片的深度和磨粒所受的粘着力,如图 3(a)和图 4 所示.由图 3(a)可以看出,在考虑粘着力前,磨粒压入芯片的深度为 0.1nm 的数量级,而分子直径的数量级亦为 0.1nm.在如此之小的压痕深度下,不应该发生宏观的

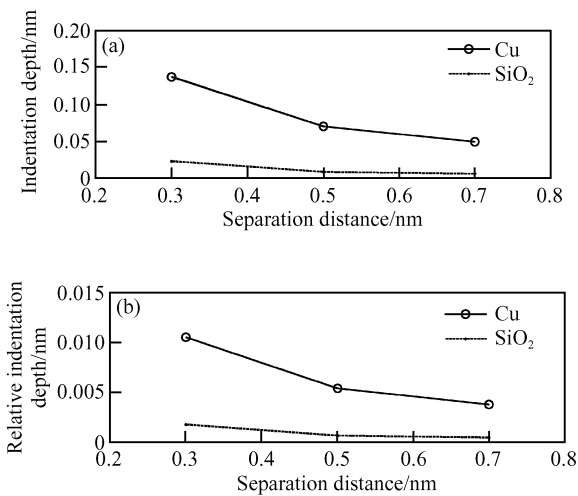


图 3 磨粒压入芯片的深度与距离 d 的关系

Fig.3 Indentation depth as a function of the separation distance

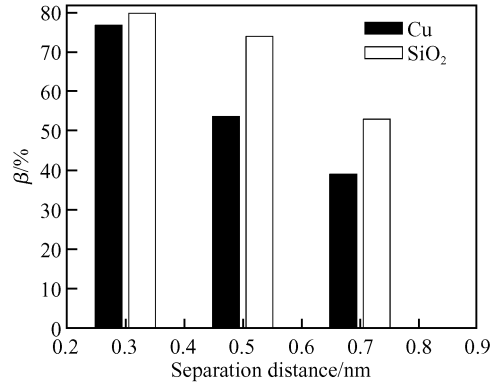


图 4 不同距离 d 下的 β 值

Fig.4 Variation of the value of β with the parameter d

材料去除.当不考虑粘着力的作用时,取 d 为 0.5nm,则磨粒压入 Cu 芯片的深度仅为 0.0475nm,压入 SiO₂ 表面的深度为 0.0032nm.而 Cu 芯片表面的压痕深度大于 SiO₂,主要是由于 Cu 表面的硬度远低于 SiO₂ 所致.

由图 4 可以看出,对于 Cu 芯片而言,粘着力在单个磨粒所受外力中占的比重为 30%~70%.对于 SiO₂ 芯片而言,粘着力在单个磨粒所受外力中占的比重为 45%~80%.上述两种情况均表明粘着力对磨粒所受外力具有很大影响.由图 5 可以看出,磨粒压入芯片的深度最大增加了 4 倍和 2 倍.但是图 3 表明,尽管粘着力对磨粒所受外力有重大影响,但是磨粒压入芯片的深度最大为分子量级.

由图 4 和图 5 可以看出,粘着力对 SiO₂ 芯片的影响比 Cu 大,原因是 SiO₂ 的 Hamaker 常数较 Cu 大.Zhang 等人^[27]的研究表明:当磨粒压入芯片的相对深度(relative indentation depth,磨粒压痕深度除以磨粒直径)小于 0.0075nm 时,芯片表面压痕变化不存在晶粒错位,应采用原子/分子的非连续理

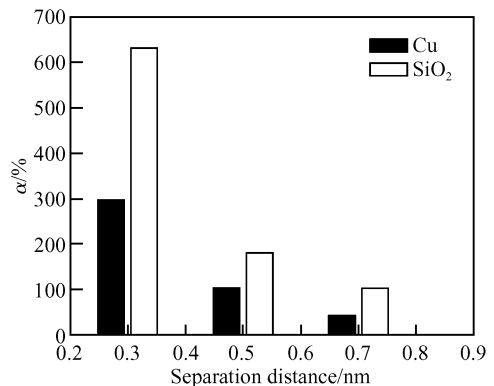


图 5 不同距离 d 下的 α 值

Fig.5 Relation between the value of α and d

论描述材料去除. 由图 3(b)可知, SiO_2 芯片的相对深度均小于 0.0075nm , 而 Cu 芯片除 0.3nm 的距离外, 均小于 0.0075nm . 对 Cu 的 CMP 而言, 表面形成氧化薄膜是获得良好抛光表面的必要条件. 因此可以认为, 应用原子/分子去除机理描述 CMP 材料去除过程更为合适.

4 结论

(1) 考虑粘着力情况下, 磨粒压入 Cu 和 SiO_2 芯片表面的深度为分子量级.

(2) 粘着力对磨粒所受合外力具有重要的影响作用.

(3) 考虑粘着力情况下, 磨粒压入 Cu 和 SiO_2 芯片表面的深度比不考虑时, 提高了 $50\% \sim 400\%$.

(4) 模型预测结果表明: 粘着力对磨粒所受外力和压痕深度具有重要的影响, 但是磨粒压入芯片的深度仍为分子量级, 对于这种微观材料去除过程, 应用分子/原子去除机理描述更为合适.

参考文献

- [1] Fury M A. The early days of CMP. *Solid State Technol.*, 1997, 40(5): 81
- [2] Evans C J, Paul E, Dornfeld D, et al. Material removal mechanisms in lapping and polishing. *Annals of the CIRP*, 2003, 152: 611
- [3] Zhao Y W, Liu J J. Recent progress in study on material mechanisms of silicon wafer during chemical mechanical polishing. *Tribol.*, 2004, 24(3): 283 (in Chinese) [赵永武, 刘家浚. 半导体芯片化学机械抛光过程中材料去除机理研究进展. *摩擦学学报*, 2004, 24(3): 283]
- [4] Zhang K L, Liu Y L, Wang F, et al. Chemical mechanical polishing of silicon wafer in ULSI. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2004, 25: (1) 115 (in Chinese) [张凯亮, 刘玉岭, 王芳, 等. ULSI 硅衬底的化学机械抛光. *半导体学报*, 2004, 25(1): 115]
- [5] Guo D M, Kang R K, Su J X, et al. Future development on wafer planarization technology in ULSI fabrication. *Chin J Mech Eng*, 2003, 39(10): 100 (in Chinese) [郭东明, 康仁科, 苏建修, 等. 超大规模集成电路制造中硅片平坦化技术的未来发展. *机械工程学报*, 2003, 39(10): 100]
- [6] Xu J, Luo J B, Lu X C, et al. Progress in material removal mechanisms of surface polishing with ultra precision. *Chin Sci Bull.*, 2004, 49 (16): 1687
- [7] Burtovyy R, Liu Y, Zdyrko B, et al. AFM measurements of interactions between CMP slurry particles and substrate. *J Electrochem Soc.*, 2007, 154(6): H476
- [8] Zhang F, Ahmed B. The role of particle adhesion and surface deformation in chemical mechanical polishing process. *Electrochem Solid-State Lett.*, 1998, 1(4): 184
- [9] Kaufman F B, Thompson D B, Broadie R E, et al. Chemical mechanical polishing for fabricating patterned W metal features as chip interconnects. *J Electrochem Soc.*, 1991, 138(11): 3460
- [10] Chang L. On the CMP material removal at the molecular scale. *J Tribol.*, 2007, 129: 436
- [11] Wang Y G, Zhao Y W. Study on the material removal mechanism in chemical mechanical polishing at molecular scale. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2007, 28(2): 130 (in Chinese) [王永光, 赵永武. 基于分子量级的化学机械抛光材料去除机理. *半导体学报*, 2007, 28(2): 130]
- [12] Wang Y G, Zhao Y W. An Order-of-magnitude calculation of material removal mechanism in chemical-mechanical polishing at molecular scale. *Tribol.*, 2007, 27(3): 259 (in Chinese) [王永光, 赵永武. 基于分子量级的化学机械抛光界面动力学模型. *摩擦学学报*, 2007, 27(3): 259]
- [13] Zhao Y W, Chang L, Kim S H. A mathematical model for chemical mechanical polishing based on formation and removal of weakly bonded molecular species. *Wear*, 2003, 254: 332
- [14] Wang Y G, Zhao Y W, Luo J B, et al. Non-continuum material removal mechanism of surface polishing with ultra precision. *Chin J Mech Eng*, 2007, 18(9): 1032 (in Chinese) [王永光, 赵永武, 雒建斌, 等. 超精密抛光材料的非连续去除机理. *中国机械工程*, 2007, 18(9): 1032]
- [15] Zhao Y W, Chang L. A micro-contact and wear model for chemical-mechanical polishing of silicon wafers. *Wear*, 2002, 252: 220
- [16] Jeng Y R, Huang P Y. A material removal rate model considering interfacial micro-contact wear behavior for chemical mechanical polishing. *J Tribol.*, 2005, 127: 190
- [17] Luo J, Dornfeld D A. Material removal mechanism in chemical mechanical polishing: theory and modeling. *IEEE Trans Semicond Manuf.*, 2001, 14(2): 112
- [18] Bastaninejad M, Ahmadi G. Modeling the effects of abrasive size distribution, adhesion, and surface plastic deformation on chemical mechanical polishing. *J Electrochem Soc.*, 2005, 152(9): G720
- [19] Kuide Q, Brij M, Chang W P. A chemical mechanical polishing model incorporating both the chemical and mechanical effects. *Thin Solid Films*, 2004, 446: 277
- [20] Wang Y G, Zhao Y W, Gu J. A new nonlinear-micro-contact model for single particle in the chemical-mechanical polishing with soft pad. *J Mater Process Tech.*, 2007, 183: 374
- [21] Hamaker H C. The London-van der waals attraction between spherical particles. *Physica A*, 1937, 4: 1058
- [22] Wiesendanger R. *Scanning probe microscopy and spectroscopy*. New York: Cambridge University Press, 1994: 345
- [23] Israelachvili J N. *Intermolecular and surface force*. New York: Academic Press, 1992: 241
- [24] Mejia D C, Beaudoin S. A locally relevant wafer-scale model for CMP of silicon dioxide. *J Electrochem Soc.*, 2003, 150(9): G581
- [25] Xia X, Ahmadi G. Surface removal rate in chemical mechanical polishing. *Part Sci Technol.*, 2002, 20: 187
- [26] Eom D, Kim I, Han J, et al. The effect of hydrogen peroxide in a citric acid based copper slurry on Cu polishing. *J Electrochemical Soc.*, 2007, 154(1): D38
- [27] Zhang L C, Tanakat H. Atomic scale deformation in silicon monocrystals induced by two-body and three-body contact sliding. *Tribol Int.*, 1998, 31(8): 425

Modeling the Effects of Adhesion Force on the Molecular-Scale Removal Mechanism in the Chemical Mechanical Polishing of Wafer^{*}

Wang Yongguang and Zhao Yongwu[†]

(School of Mechanical Engineering, Jiangnan University, Wuxi 214122, China)

Abstract: A novel mathematical model based on the force balance of wafer/particle/pad is developed for chemical mechanical polishing (CMP). The main feature of the model is the incorporation of the particle adhesion force and the large deformation of the particle and pad. The model shows that the adhesion force can significantly influence the load force of particles and the indentation depth of particles into Cu and SiO₂ wafer surfaces. Furthermore, the model also predicts that the indentation depth of the particle into the wafer surface considering the adhesion force is two or four times than that of without an adhesion force. However, the magnitude of the indentation depth is on the order of molecular scale. The results and analysis reveal some insights into the molecular scale removal mechanism on the performance of the CMP.

Key words: chemical mechanical polishing; adhesion force; molecular-scale removal; modeling

EEACC: 2550E; 2570

Article ID: 0253-4177(2007)12-2018-05

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Jiangsu Province (No. BK2004020), the Scientific Research Foundation for the Returned Overseas Chinese Scholars of the Ministry of Education of China (No. 2004527), and the Tribology Science Foundation of the State Key Laboratory of Tribology in Tsinghua University in China (No. SKLT04-06)

[†] Corresponding author. Email: zhaoyw@sytu.edu.cn

Received 30 May 2007, revised manuscript received 5 July 2007

©2007 Chinese Institute of Electronics