

铜化学机械抛光材料去除机理的准连续介质法研究

朱爱斌^{1,2}, 路新春¹, 张浩², 陈渭², 谢友柏²

(1. 清华大学摩擦学国家重点实验室, 10084, 北京; 2. 西安交通大学现代设计及
转子轴承系统教育部重点实验室, 710049, 西安)

摘要: 采用准连续介质力学方法研究了铜化学机械抛光过程的机械作用材料去除机理. 模拟了不同大小磨粒在单晶铜工件上的磨削过程, 分析了切削过程中工件内部材料变形、切屑的形成以及工件内部应力分布和切削力变化. 研究表明, 工件内部材料沿着与切削方向约 45° 变形形成剪切带, 在剪切带区域伴随有位错、滑移等现象产生. 磨粒较小时加工后的表面质量较差, 磨粒较大时加工质量较好, 但会造成工件内部较大的塑性变形与更深的残余应力分布. 磨粒尺寸变化对于切向切削力影响不大.

关键词: 化学机械抛光; 准连续介质法; 单晶铜; 残余应力

中图分类号: TH117.3 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2011)12-0111-05

Investigation for Material Removal Mechanism in Copper Chemical Mechanical Polishing with Quasi-Continuum Method

ZHU Aibin^{1,2}, LU Xinchun¹, ZHANG Hao², CHEN Wei², XIE Youbai²

(1. State Key Laboratory of Tribology, Tsinghua University, Beijing 10084, China; 2. Key Laboratory of Education Ministry for Modern Design and Rotor-Bearing System, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: Quasi-continuum method is adopted to investigate the material removal mechanism of chemical mechanical polishing of copper. The grinding process on the single crystal workpiece of abrasive particles of different sizes is simulated to analyze material deformation, stress distribution in the workpiece, chip formation and cutting force fluctuation. The result shows that shear zone is formed at 45° to the polishing direction with dislocations and sliding in the bulk. Smaller abrasive particles result in bad surface quality, while larger particles generate larger plastic deformation and deeper residual stress layer. Particle size exerts little influence on the tangential cutting force.

Keywords: chemical mechanical polishing; quasi-continuum method; single crystal copper; residual stress

在 IC 制造中, 化学机械抛光(CMP)技术不仅是单晶硅片加工中获得超光滑无损伤表面的最有效方法, 也是多层布线中主要的层间平坦化方法^[1]. CMP 技术是从实践中发展起来的, 其发明、发展及走向应用都是在工业界而不是在学术界完成的, 因

而系统性的研究, 尤其是理论研究还比较欠缺^[2]. CMP 工艺过程的精确控制在很大程度上取决于对其材料去除机理的认识和理解. 目前, 关于 CMP 材料去除机理的研究包括 Preston^[3] 的唯象学研究、Runnels 等^[4] 的流体力学去除机理以及 Zhao 等^[5]

收稿日期: 2011-06-16. 作者简介: 朱爱斌(1975—), 男, 博士生; 路新春(通信作者), 男, 教授. 基金项目: 国家杰出青年科学基金资助项目(50825501); 国家自然科学基金创新研究群体科学基金资助项目(51021064); 国家科技重大专项资助项目(2008ZX02104-001).

网络出版时间: 2011-10-25

网络出版地址: <http://www.cnki.net/kcms/detail/61.1069.T.20111025.0856.006.html>

的接触学去除机理等,虽然对去除机理建立了多种模型,但由于 CMP 纳米材料去除的基本机理还不清楚,现有的研究及实验结果还有很多相互矛盾的地方. Han 等^[6]、Si 等^[7]采用分子动力学方法来研究 CMP 材料去除机理,然而分子动力学方法能够模拟的系统规模有限. 目前,研究人员采用分子动力学模拟 CMP 过程一般所能模拟的磨粒半径最大不超过 10 nm,这与实际 CMP 过程中的平均磨粒半径 50 nm^[8]相差较大.

真实物理系统所包含的微观粒子的数量往往高达 10²³数量级,而目前即使采用最先进的巨型计算机,能够模拟的原子数也不过 10¹⁰数量级^[9]. 准连续介质方法^[10](QC)的基本思想是把原子模型嵌入到连续介质模型中,采用分子动力学方法计算变形剧烈且不均匀的微小区域,而其他区域采用连续介质力学方法计算,在保证精度的条件下大大减少了计算量. 在超精密加工方面,文献[11]采用准连续介质法模拟了镍单晶体刀具在单晶铜工件上的切削过程,文献[12]使用准连续介质方法进行了单晶铝纳米切削过程的模拟. 目前,还未见采用准连续介质方法进行 CMP 纳米材料去除机理的研究.

本文采用准连续介质方法,建立了结合分子动力学和有限元的单晶铜 CMP 过程的仿真模型,模拟了铜 CMP 过程中不同大小磨粒在单晶铜工件上的磨削过程,深入分析了切削过程中工件内部材料变形、切屑的形成以及工件内部应力分布和切削力的变化,以期对 CMP 纳米材料去除的基本机理的研究有所贡献.

1 准连续介质方法与模型

1.1 准连续介质方法

QC 方法耦合了原子和连续介质区域,在固体变形缺陷核心附近使用原子尺度解,在远离缺陷核心处的不敏感区域以代表原子为特征进行粗化描述,在减少自由度的情况下计算系统的能量和力,实现原子和连续介质的耦合.

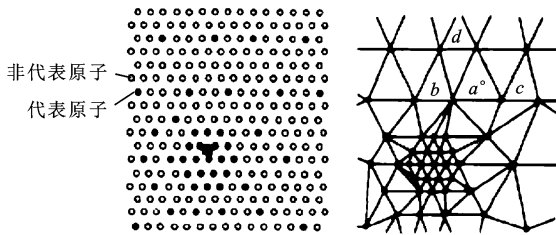
图 1 解释了 QC 方法的基本原理^[13]. 在需要完全原子细节描述的区域,可将所有原子都选为代表原子,在变形梯度较小的区域减少代表原子密度. 如图 1 所示,将位于位错核心区域的原子全部选为代表原子,而远离位错核心区域代表原子密度减小. 图 1b 是相应的代表原子构成的有限元网格,在一个三角形单元中,代表原子 b、c、d 为有限元节点,a 为非代表原子. 非代表原子(如图 1b 中空心原子 a)的位

移由所在单元的代表原子位移利用线性插值求出

$$u(X_A) = S_B(X_A)u_B + S_C(X_A)u_C + S_D(X_A)u_D$$

(1)

式中: S_B 、 S_C 和 S_D 为插值函数.



(a)原子示意图 (b)有限元网格示意图
图 1 代表原子示意图

1.2 仿真模型

本文采用 QC 程序计算内核,在此基础上进行二次开发实现了仿真模拟. 整个计算程序包括计算参数、网格划分、边界条件、外部载荷、QC 计算内核和结果输出等模块,如图 2 所示. 在用户指定材料属性、势函数、模型几何参数、载荷步等,设定模型边界条件,设定网格形状和单元类型,设定外部载荷之后,通过 QC 计算内核进行计算,确定原子状态,计算系统能量和节点位移与力等,最后输出结果进行分析.

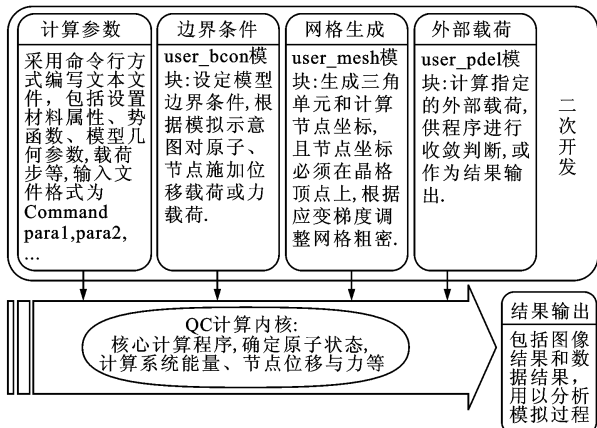


图 2 QC 模块及其功能

在 CMP 过程中,抛光液中部分磨粒嵌入抛光垫表面,每个嵌入的磨粒相当于一个固定磨料对工件表面进行犁削,达到工件材料去除,见图 3. 本文模拟了这一单一的抛光过程,仿真模型如图 4 所示. 由图可见,单晶铜工件由有限元网格划分,工件顶层网格越来越密直至完全成为原子区域,实现了原子方法与有限元方法的耦合. 工件尺寸为 50 nm×25 nm,工件包含约 40 000 个原子,而需要计算的代表原子个数不足 5 000,大大减小了计算量.

磨粒最初被置于工件左边,对其进行位移加载,载荷步增量设为 0.03 nm,总共 300 个载荷步. 沿着

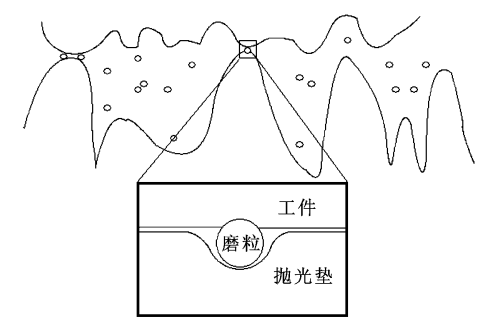


图 3 CMP 材料去除模型

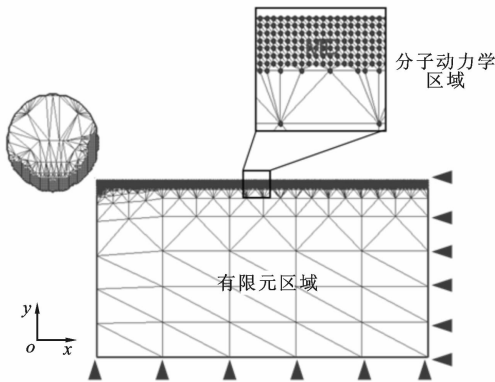


图 4 分子动力学和有限元结合的 QC 仿真模型

工件(001)晶面 $[100]$ 方向进行切削,切削深度为 1 nm,工件的底部和最右端面施加固定约束.由于 QC 方法的静态特性,程序每加载一步执行一次能量最小化,故在每个载荷步系统都处于平衡状态.相对于工件,磨粒的刚度很高,其变形对于仿真过程影响极其微小,为了方便起见,将磨粒设为刚性体,不考虑它的变形.磨粒半径分别取为 5、10、20 nm 进行模拟,与分子动力学方法相比,本文所模拟的磨粒大小更接近真实情况.

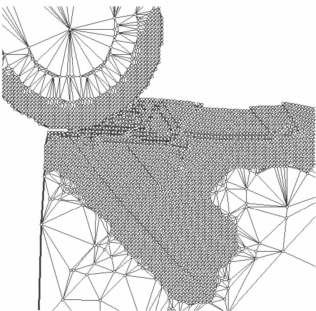
对于工件 Cu 材料,本文采用了嵌入原子势函数,仿真程序在 Linux 系统环境下运行,计算时间随着磨粒直径增大略有增加.模型选取面心立方单晶铜作为工件材料,晶体取向为 $x\langle 100 \rangle$ 、 $y\langle 011 \rangle$,尺寸为 50 nm $\times$ 25 nm,约包含 4 万个原子,磨粒半径分别选取 5、10、20 nm,切削深度为 1 nm.

2 仿真结果与分析

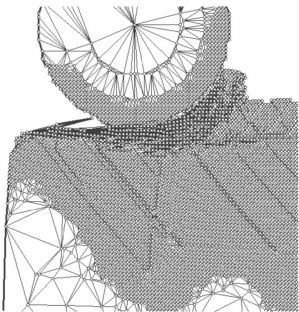
图 5~图 7 分别为磨粒半径为 5、10、20 nm 时,在第 50 和第 200 个载荷步磨粒切削过程的原子位移图像.由图 5 可见,磨粒半径为 5 nm 时,切屑随着磨粒前移而逐渐堆积在其前部,对磨粒向前运动造成阻碍.当磨粒半径为 10 nm 和 20 nm 时,随着磨粒半径增大,不再有明显的切屑堆积,这是由于磨粒

与工件接触面的角度减小,磨粒前部切屑主要受到挤压作用所致.

在犁削过程中,随着磨粒向前移动,工件与磨粒接触区域原子晶格发生初始变形,并沿着约 45°方向扩展形成剪切带,变形主要是由压缩和剪切作用

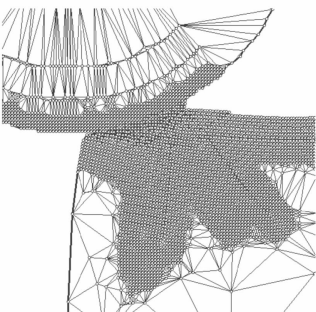


(a)第 50 个载荷步

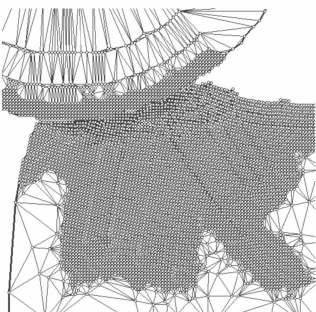


(b)第 200 个载荷步

图 5 磨粒半径为 5 nm 时的原子位移图像

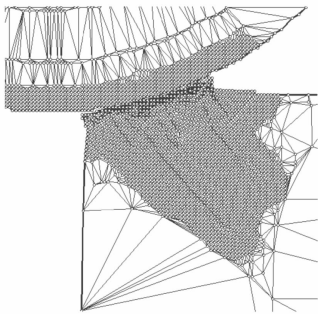


(a)第 50 个载荷步

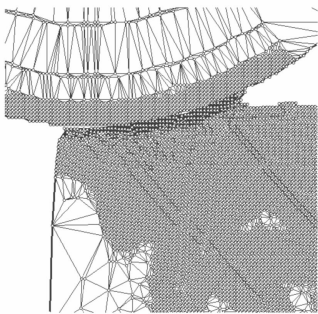


(b)第 200 个载荷步

图 6 磨粒半径为 10 nm 时的原子位移图像



(a)第 50 个载荷步



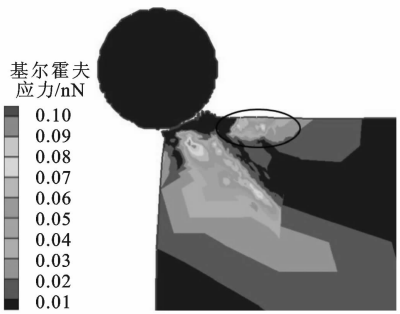
(b)第 200 个载荷步

图 7 磨粒半径为 20 nm 时的原子位移图像

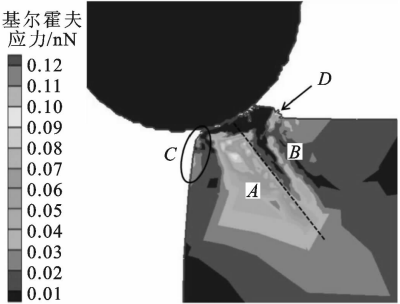
造成的. 随着磨粒的移动, 在变形区域产生位错、滑移等现象. 当储存在变形晶格中的应变能超过一定值时, 原子将重新排列以便释放多余的能量, 释放能量后原子又重新处于平衡状态. 当应变能不足以重新排列原子时, 一些原子区域成块移动, 在工件材料表面形成台阶状.

当磨粒半径为 5 nm 时, 工件材料由磨粒的剪切作用去除, 加工后的工件表面质量较差. 当磨粒半径为 10 nm 和 20 nm 时, 磨粒半径增大后, 工件材料受到磨粒的剪切和挤压作用, 加工后的工件表面质量较好, 但工件内部变形也更深.

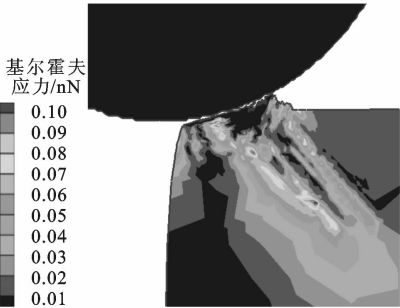
图 8 为磨粒半径分别为 5、10、20 nm, 仿真过程第 70 个载荷步的工件内部应力分布云图. 由图 8b 可见, 大部分应力集中在磨粒下方变形区域, 沿着剪切带分布. 工件内部应力分布复杂, 在磨粒下方 A 区域, 工件材料受压发生塑性变形, 有大量应力集中在此区域, 仅有少量应力分布在 B 区域. 工件左端 C 区域受拉伸作用有一定应力产生, 随着磨粒向前运动应力逐渐增大, 切屑堆积区域前部 D 处也有应力产生. 图 8a、图 8c 与上述情况基本相同, 但随着磨粒半径增大其对下部工件材料挤压作用越强, 应力在工件内部分布也越深. 与其他两种情况不同, 磨粒半径为 5 nm 时, 切屑堆积区域前方有较多应力产生 (见图 8a), 这与不同的切屑堆积方式有关.



(a)磨粒半径为 5 nm



(b)磨粒半径为 10 nm



(c)磨粒半径为 20 nm

图 8 第 70 载荷步的工件应力分布图

由于磨粒为匀速运动, 磨粒的切削力等于工件原子对磨粒原子的作用力, 可由磨粒全部原子所受力求和得到. 磨粒所受切削力为

$$F_{\text{cut}} = \sum_k^{N_{\text{cut}}} f(k) \tag{2}$$

式中: N_{cut} 为磨粒中的原子总数; $f(k)$ 为磨粒中第 k 个原子所受的作用力.

图 9 是不同直径磨粒切削过程的载荷-位移曲线. 由图可见, 在切削开始阶段, 切向力随着切削位移增加而迅速上升, 随后进入相对稳定的状态, 曲线中的波折、突降与工件内部的位错形核有关. 磨粒半径为 5、10、20 nm 时, 对应的平均切向切削力分别为 9.78、11.40、8.81 nN. 当载荷位移为 4~10 nm 之间时, 计算得到平均切削力分别为 6.75、9.36、7.87 nN, 可见磨粒半径变化对切向切削力影响不大.

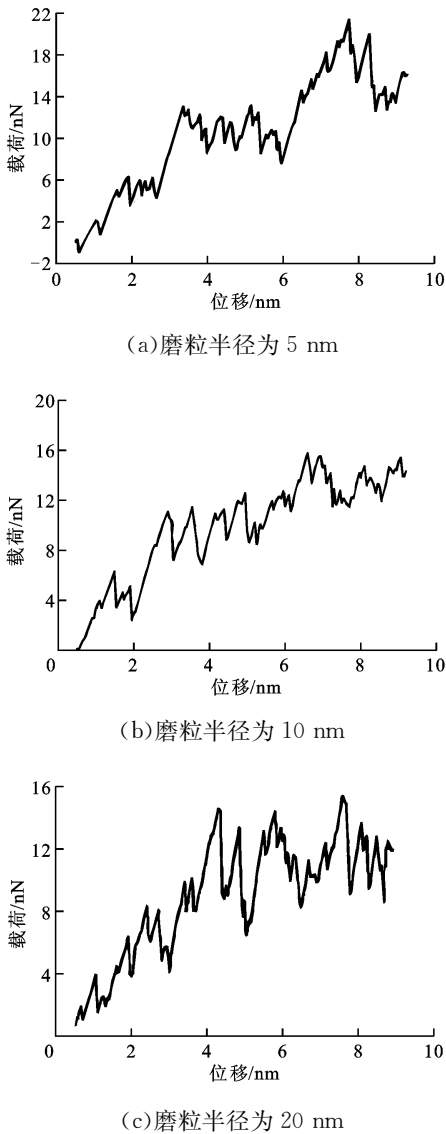


图9 磨粒的切削载荷-位移曲线

3 结 论

- (1)工件内部材料沿着与切削方向约 45°变形形成剪切带,在剪切带区域伴随有位错、滑移等现象产生.
- (2)磨粒较小时有明显的切屑堆积,加工后的表面质量较差;磨粒较大时,加工质量较好但造成工件内部较大的塑性变形.
- (3)工件内部残余应力主要集中在沿着剪切带、磨粒前部切屑堆积区域和工件最左端加工区域,且磨粒越大应力分布也越深.
- (4)磨粒尺寸变化对于切向切削力影响不大.

参考文献:

[1] 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[J]. 机械工程学报, 2003, 39(10): 100-105.

GUO Dongming, KANG Renke, SU Jianxiu. Future development on wafer planarization technology in fabrication[J]. Chinese Journal of Mechanical Engineering, 2003, 39(10):100-105.

[2] 雷红,雒建斌,张朝辉. 化学机械抛光技术的研究进展[J]. 上海大学学报:自然科学版,2003, 9(6): 494-502.

LEI Hong, LUO Jianbin, ZHANG Chaohui. Advances in chemical mechanical polishing[J]. Journal of Shanghai University: Natural Science Edition, 2003, 9(6): 494-502.

[3] PRESTON F. The theory and design of plate glass polishing machines[J]. Journal of the Society of Glass Technology, 1927, 11(2): 214-257.

[4] YE Y, BISWAS R, BASTAWROS A, et al. Simulation of chemical mechanical planarization of copper with molecular dynamics[J]. Applied Physics Letters, 2002, 81(10):1875-1877.

[5] ZHAO Yongwu, CHANG L. A micro-contact and wear model for chemical-mechanical polishing of silicon wafer[J]. Wear, 2002, 252(3/4):220-226.

[6] HAN Xuesong, HU Yuanzhong, YU Siyuan. Investigation of material removal mechanism of silicon wafer in the chemical mechanical polishing process using molecular dynamics simulation method[J]. Applied Physics: A Materials Science & Processing, 2009, 95(3):899-905.

[7] SI Lina, GUO Dan, LUO Jianbin, et al. Monoatomic layer removal mechanism in chemical mechanical polishing process: a molecular dynamics study [J]. Journal of Applied Physics, 2010, 107 (6): 064310.1 - 064310.7.

[8] LARSEN-BASSE J, LIANG H. Probable role of abrasion in chemical mechanical polishing tungsten [J]. Wear, 1999, 233/235(12):647-654.

[9] ABRAHAM F F, GAO H J. How fast can crack propagate? [J]. Physical Review Letters, 2000, 84(14): 3113.

[10] TADMOR E B, ORTIZ M, PHILLIPS R. Quasi-continuum analysis of defects in solids[J]. Philosophical Magazine: A, 1996, 73(6):1529-1563.

[11] 赵晨,江五贵. 纳米尺度下切削过程的准连续介质力学模拟[J]. 摩擦学学报, 2009, 29(6):505-511.

ZHAO Sheng, JIANG Wugui. Quasicontinuum simulations of nano-cutting process[J]. Tribology, 2009, 29(6):505-511.

- [12] 孙西芝,陈时锦,程凯. 基于多尺度仿真方法的单晶铝纳米切削过程研究[J]. 南京理工大学学报:自然科学版, 2008,32(2):144-148.
- SUN Xizhi, CHEN Shijin, CHEN Kai. Multiscale simulation of nanometric cutting of single crystal aluminium[J]. Journal of Nanjing University of Science and Technology: Natural Science, 2008, 32(2): 144-148.

- [13] 倪玉山,王华滔. 准连续介质方法及其应用[J]. 机械工程学报, 2007, 43(8):101-108.
- NI Yushan, WANG Huatao. Quasicontinuum method and its applications[J]. Chinese Journal of Mechanical Engineering, 2007, 43(8): 101-108.

(编辑 杜秀杰)