

探討化學機械研磨之最適化製程參數

李建德* 林有鎰** 邱進東***

*德霖技術學院機械工程系助理教授

**德霖技術學院機械工程系教授

***德霖技術學院機械工程系副教授

摘要

本文首先建立化學機械研磨製程之二維軸對稱有限元素模式，此模式包括晶圓承載器、載具膜、晶圓、維持環與研磨墊五層結構，負荷形式為晶圓承載器負荷、載具膜局部背壓和維持環負荷。接著，以二次搜尋最佳化演算模式找出達到晶圓表面不平坦度最小化的目標時，載具膜局部背壓、維持環負荷、晶圓-維持環間距、研磨墊厚度和彈性係數等設計變數的最佳組合。結果發現(1)載具膜局部背壓、維持環負荷分別為 0.003448MPa 和 0.89776MPa、晶圓-維持環間距為 0.0mm、研磨墊厚度為 0.738706mm、研磨墊彈性係數為 2.29655MPa 時，晶圓表面最小不平坦度為 0.07384；(2)比較最佳和初始加工條件下之晶圓表面不平坦度，改善程度達到 69.51%。

關鍵字：化學機械研磨、有限元素模式、最佳化、局部背壓、維持環

Investigations on Optimal Process Parameters in Chemical Mechanical Polishing

Chien-Te Li* Yeou-Yih Lin** Jinn-Tong Chiu***

De Lin Institute of Technology, Department of Mechanical Engineering

* Assistant Professor ** Professor *** Associate Professor

Abstract

In this paper, a 2D axisymmetric finite element model for chemical-mechanical polishing process (CMP) was established. In this model, the five-layer structures including carrier, carrier film, wafer, retaining ring and pad will be involved. Force forms are the carrier's load, the local back pressure of carrier film and the load of retaining ring. Furthermore, a quadratic searching optimization algorithm model was constructed to search for the optimal design variables including back pressure of film, load of retaining ring, distance between the wafer and the ring, thickness and elastic modulus of pad in order to attain the minimization of surface nonuniformity. The results indicated that (1) under the conditions that the local back pressure of film and load of retaining ring were 0.003448MPa and 0.89776MPa, the distance between the wafer and the ring was 0.0mm, the thickness of pad was 0.738706mm and the elastic modulus of pad was 2.29655MPa, the minimum nonuniformity on the wafer surface (=0.07384) was achieved, (2) comparing the nonuniformity under the optimal and original condition, the improvement was 69.51%.

Keywords: CMP, finite element model, optimization, local back pressure, retaining ring

壹、緒論

化學機械研磨製程主要是利用研磨墊、研磨液，配合機械動作，將晶圓表面的金屬薄膜研磨除去，以達到所要求的平坦度。圖 1 為化學機械研磨製程之示意圖。它是由晶圓承載器、載具膜、研磨墊、維持環和研磨平台組合而成。其中加工過程為晶圓承載器靠真空、透過載具膜、吸住晶圓背面，然後將晶圓表面，置於貼有一層或多層研磨墊的研磨平台上；研磨液則由導管控制持續不斷地供給，均勻散佈於研磨墊，成為中間介質，而固定於晶圓承載器與研磨墊間的晶圓，則被施予一向下的正向壓力。藉由承載器與研磨平台旋轉所產生的相對運動，對晶圓進行機械研磨，使晶圓表面與研磨液中微粒子接觸產生機械摩擦、化學結合與化學液溶去的複合作用，進行高效率的研磨去除加工。而利用維持環機構，將晶圓邊緣所產生的應力集中轉嫁到維持環與研磨墊的接觸面上，來改善和補償上述邊緣過度研磨的現象，並防止晶圓於研磨過程中滑出晶圓承載器，如圖 2 所示。

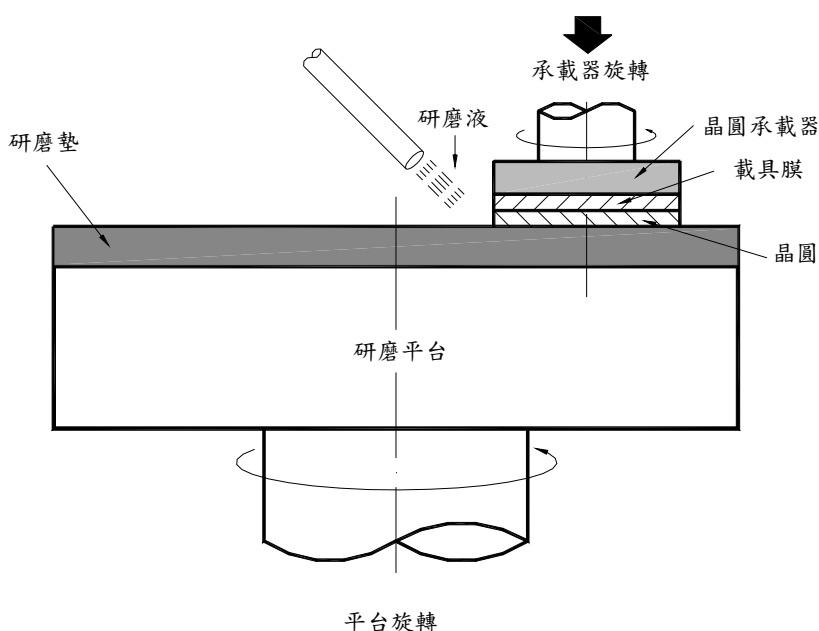


圖 1 化學機械研磨製程示意圖

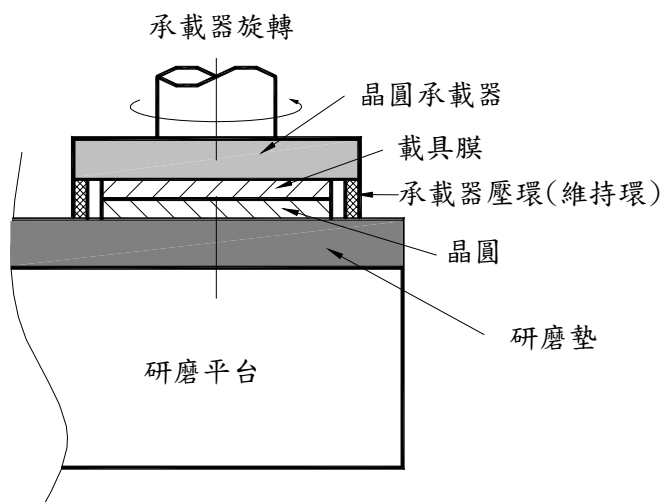


圖 2 承載器維持環裝置示意圖

由圖 1 知化學機械研磨製程的加工機制在本質上是雜亂且不確定的，要解析其磨耗機制是相當困難，因此適當的簡化模型及建構化學機械研磨製程之二維軸對稱準靜態有限元素模式以模擬磨耗機制是必要的，且亦有必要建立要達到晶圓表面不平坦度最小化的目標時，載具膜局部背壓、維持環負荷、晶圓-維持環間距、研磨墊厚度和彈性係數等參數的最佳組合。

Runnels 和 Renteln[1]以軸對稱的模型，假設(1)研磨墊與晶圓中間無力傳遞、(2)研磨墊為彈性、(3)忽略研磨劑效應。模擬晶圓表面的應力分佈並重寫 Preston 公式，而推導出材料移除率與應力之間的關係，顯示材料移除率受正向壓力影響顯著。Srinivasa 等[2]建立一化學機械研磨製程的線彈性研磨模式。它忽略了研磨液作用，假設晶圓表面的剪應力是均勻分佈，藉由 von Mises 應力分佈狀況預測晶圓表面不平坦度，經 ANSYS 套裝軟體模擬，結果顯示應力分佈狀況確實對表面不平坦度造成影響。Wang 等[3]建立化學機械研磨之二維軸對稱線彈性模式，經 I-DEAS 套裝軟體模擬，得到晶圓表面之受力情形，結果與[2]均有邊緣應力大增的現象，但位置卻不大相同。Lin 和 Lo[4][5]依據最小總位能原理和軸對稱彈性應力-應變關係式，建立一個化學機械研磨製程之二維軸對稱準靜態有限元素模式，分析研磨過程中，晶圓表面的 von Mises 應力分佈趨勢，軸向應力、環向應力、徑向應力和剪應力對 von Mises 應力的影響及軸向應變、環向應變、徑向應變和剪應變對晶圓變形的影響。結果發現 von Mises 應力在靠近晶圓邊緣處，有陡昇的晶圓邊緣效應；軸向應力和軸向應變是影響晶圓表面的 von Mises 應力分佈和變形的主要因素。他們進一步分析晶圓表面的 von Mises 應力分佈趨勢，研磨墊、載具膜的特性和晶圓承載器負荷對晶圓表面應力和不平坦度的影響。結果得到晶圓表面的 von Mises 應力分佈和材料移除率有相似的趨勢，研磨墊的彈性模數、厚度和晶圓承載器負荷的改變對晶圓表面應力和不平坦度有較大的影響，而載具膜的影響並不大。吳建立[6]以 ANSYS 套裝軟體進行化學機械研磨製程的模式建立和數學模擬，以研究晶圓承載器正向壓力與平坦化的關係，並以二次序列規劃法求解目標函數為不平坦度的極小化問題。Chiu 等[7]和 Lin 等[8]以 CMP 製程有限元素模擬結果為資料庫，透過倒傳類神經網路和 direct search complex optimal method 得到最適的製程參數。

本文藉由發展一套包括晶圓承載器、維持環、載具膜、晶圓和研磨墊等結構的二維軸對稱有限元素法，負荷形式為晶圓承載器負荷、載具膜局部背壓和維持環負荷。進一步，以二次搜尋最佳化演算模式找出要達到晶圓表面不平坦度最小化的目標時，包括載具膜局部背壓、維持環負荷、晶圓-維持環間距、研磨墊厚度和彈性係數等設計變數的最佳組合。

貳、理論基礎

(1) 二維軸對稱準靜態模式

圖 3 為晶圓和研磨墊相對運動示意圖。在化學機械研磨過程中，我們可以對研磨正壓力參數加以控制，而相對速度可以分解為研磨墊轉速及晶圓轉速之關係式，亦即對任一個位於晶圓上之加工點 A 而言，其對於研磨墊之相對速度 \vec{V} 為

$$\vec{V} = -(\vec{\omega}_p * \vec{R}_{wp}) - \vec{R}_w * (\vec{\omega}_w - \vec{\omega}_p) \quad (1)$$

式中， $\bar{\omega}_w$ ：晶圓轉速， $\bar{\omega}_p$ ：研磨墊轉速， \bar{R}_{wp} ：研磨墊中心到晶圓中心之距離， \bar{R}_w ：晶圓上之加工點 A 到晶圓中心之距離。

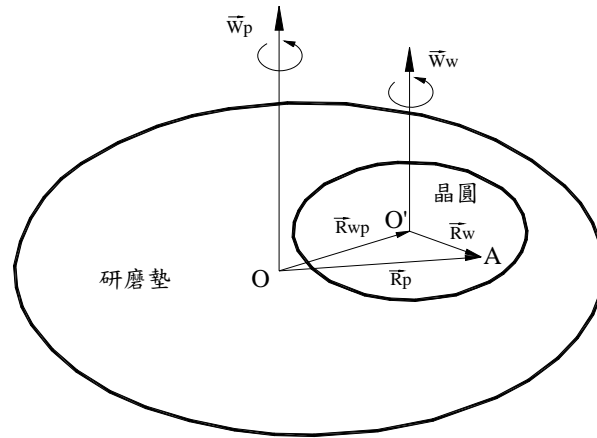


圖 3 晶圓和研磨墊相對運動示意圖

由(1)式，若研磨墊與晶圓具有相同的角速度與方向，即 $\bar{\omega}_w = \bar{\omega}_p$ ，則晶圓上之加工點 A 的相對速度 \bar{V} 為 $-(\bar{\omega}_p * \bar{R}_{wp})$ ，它是一個定值。依此，可以得到晶圓表面與研磨墊之間的剪應力為定值，且均勻分佈於兩者的界面，因此本文忽略剪應力的影響而建立一個準靜態模式；而在數學模式建構上，因受力形式為軸對稱分佈，且若假設研磨墊為一大的平整平面，則幾何形狀也可以軸對稱分佈來簡化，故本文可以簡化成為一個二維軸對稱準靜態模式，如圖 4 所示。圖中，P1 為晶圓承載器均佈負荷、P2 為維持環均佈負荷、P3 為載具膜局部背壓、W 為晶圓-維持環間距。

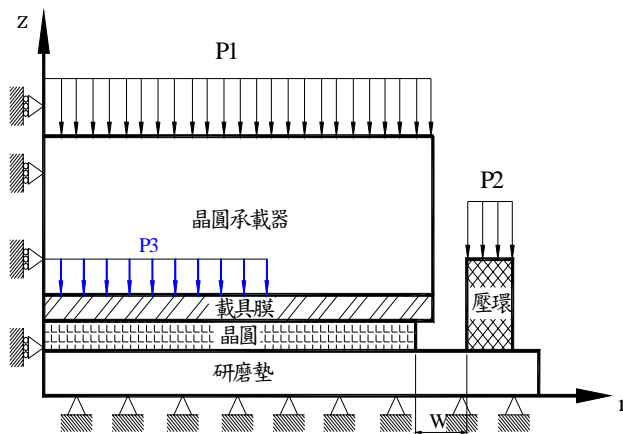


圖 4 二維軸對稱準靜態模式

(2) 有限元素統御方程式

依據最小總位能原理[9]，並導入軸對稱彈性應力-應變關係，則二維線彈性有限元素統御方程式為：

$$[K]\{d\} = \{F\} \tag{2}$$

式中， $[K]$ 為線彈性剛性矩陣， $\{d\}$ 為節點位移， $\{F\}$ 為節點負荷。

(3) 有限元素模式

本文分割成 4736 個元素和 2528 個節點。基本假設為(1)晶圓承載器、載具膜、晶圓、研磨墊與維持環五者皆為平整之平面。(2)以上五種材料皆具等向性。(3)晶圓承載器、載具膜、晶圓、維持環和研磨墊之相鄰面皆為緊密接合。此外，邊界條件為(1)受力型式為均勻施加於晶圓承載器負荷、載具膜局部背壓和維持環負荷。(2)左側為對稱邊界，承受滾輪支撐，其節點在徑向的位移為零。(3)研磨墊底部表面為固定，亦即此處的節點位移恆為零。(4)晶圓承載器、載具膜、晶圓、維持環和研磨墊間為緊密接合，因此相接節點於變形時擁有相同的變形量。

(4) 模式驗證

本文根據 Wang 等[3]，以 von Mises 等效應力作為模擬應力之結果，其 von Mises 應力於二維軸對稱模型中可以簡化為：

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\sigma_{rr} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{\theta\theta})^2 + (\sigma_{rr} - \sigma_{\theta\theta})^2 + 6\tau_{rz}^2]^{\frac{1}{2}} \quad (3)$$

式中， $\bar{\sigma}$ ：von Mises 應力， σ_{rr} 、 $\sigma_{\theta\theta}$ 、 σ_{zz} 和 τ_{rz} ：徑向、環向、軸向應力和剪應力。

另將晶圓表面不平坦度定義為應力偏差比率，以下式表示：

$$R = \frac{1}{\bar{\sigma}_{ave}} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\bar{\sigma}_i - \bar{\sigma}_{ave})^2}{n}} \quad (4)$$

式中， R ：晶圓表面不平坦度，又稱為 WIWNU(within-wafer NU)， $\bar{\sigma}_{ave}$ ：von Mises 應力平均值， $\bar{\sigma}_i$ ：晶圓表面第 i 個節點的 von Mises 應力， n ：晶圓表面節點數。

在忽略研磨液的化學作用的條件下，材料性質與幾何尺寸條件，如表 1 所示，承受晶圓承載器和維持環所施加的 0.069MPa 和 0.0414MPa 壓力，以有限元素法計算晶圓表面的 von Mises 應力分佈。圖 5 為模擬的晶圓表面 von Mises 應力和距晶圓中心的距離的關係。由圖 5 顯示在靠近晶圓中心處，von Mises 應力分佈平坦，變化不大，然後有陡昇的突然變動，在靠近材料邊緣處，應力值達到最大值，而後明顯的下降；最後在邊緣處，應力值再次上升。此結果與 Wang 等[3]的模擬結果和材料移除率實驗值相類似。由此證明本文所建立的分析模式具有一定的可行性。

表 1 材料性質與幾何尺寸[3]

	彈性係數 (MPa)	柏松比	半徑 (mm)	厚度 (mm)
晶圓承載器	206896.55	0.3	100.33	7.62
載具膜	0.2655	0.1	100.33	0.635
晶圓	206896.55	0.3	100.0	0.706
研磨墊	2.29655	0.1	127.0	1.397
維持環	206896.55	0.3	內 100.75	8.961
			外 103.75	

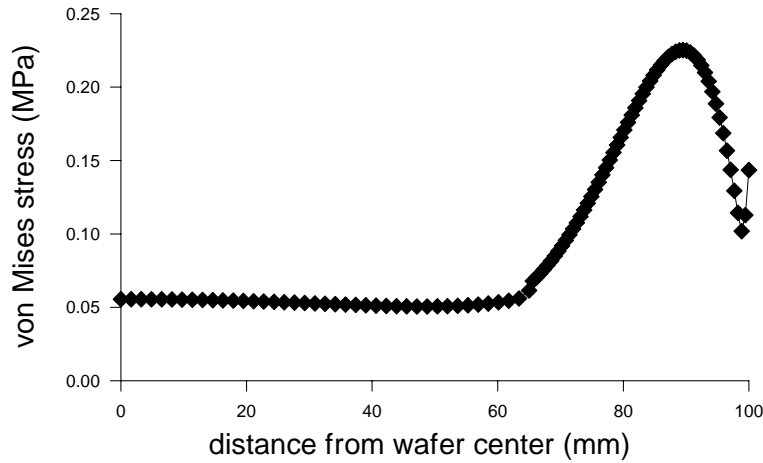


圖 5 晶圓表面 von Mises 應力的分佈情形

參、CMP 最佳化模式

本文以二次搜尋最佳化方法(quadratic searching optimization method)搜尋目標函數最小時的最佳設計變數組合，其中設計變數包括載具膜局部背壓、維持環負荷、晶圓-維持環間距、研磨墊厚度和彈性係數，目標函數為晶圓表面不平坦度。

(1) 二次搜尋最佳化方法

二次搜尋最佳化方法[10]敘述如下：

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \tag{5}$$

$$\text{subject to } g_j(x) \geq 0, \text{ for } j=1, \dots, m_c \tag{6}$$

式中， m_c 為非等式限制條件數目， x 為設計變數集合， $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_N$ 為個別的設計變數， N 為設計變數的個數。設計變數在一定的上下限之間

$$x_\ell \leq x \leq x_u \tag{7}$$

式中， x_ℓ, x_u 向量為設計變數的上下限值， 假設上述的函數皆為連續可微分，為了方便利用疊代法求解，將最適化模型以二次式近似為以下的子問題。

$$\min_{d \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2} d^T B_k d + \nabla f(x_k)^T d \tag{8}$$

$$\text{subject to } \nabla g_j(x_k)^T d + g_j(x_k) \geq 0, \text{ for } j = 1, \dots, m \tag{9}$$

$$x_\ell - x_k \leq d \leq x_u - x_k \tag{10}$$

式中， B_k 為近似的 Hessian 矩陣， x_k 為設計變數第 k 次疊代值， d_k 為子問題的解。

$\nabla g_j(x_k), \nabla f(x_k)$ 是在有限元素模型中利用有線差分法同時求得。

利用線搜尋(line search)以求得下一疊代值 x_{k+1} 。

$$x_{k+1} = x_k + \lambda d_k, \quad \lambda \in (0,1) \tag{11}$$

以上述步驟逐步求解二次方程式，而得到最適化解。

(2) 最佳化模式和結果

由於本文係以尋找最佳化模式為主，因此重點在如何找出最佳加工條件。當將二次搜尋最佳化方法應用到 CMP 時， x 為設計變數，即製程參數包括載具膜局部背壓、維持環負荷、晶圓-維持環間距、研磨墊厚度和彈性係數等五項，而 $f(x)$ 為目標函數，即晶圓表面不平坦度。設計變數的上下限，如表 2 所示。圖 6 為設計變數 normalized 值的搜尋履歷。圖 7 為目標函數(晶圓表面不平坦度)的履歷，由圖 7 知隨著迭代次數的增加，跳動的目標函數漸趨穩定且值很小。表 3 為設計變數初始值和最佳值下之晶圓表面不平坦度的比較，要達到最小的晶圓表面不平坦度，最佳的條件為載具膜局部背壓、維持環負荷分別為 0.003448MPa 和 0.89776MPa、晶圓-維持環間距為 0.0mm、研磨墊厚度為 0.738706mm、研磨墊彈性係數為 2.29655MPa。另比較初始加工條件和最佳加工條件之晶圓表面不平坦度分別為 0.2422 和 0.07388，二者比較改善程度達 69.51%。

表2 設計變數的上下限

設計變數	下限	上限
Bp	0.003448	0.010345
Rp	0.4	1.2
W	0.0	1.5
Tp	0.6985	2.0955
Ep	2.29655	68.948

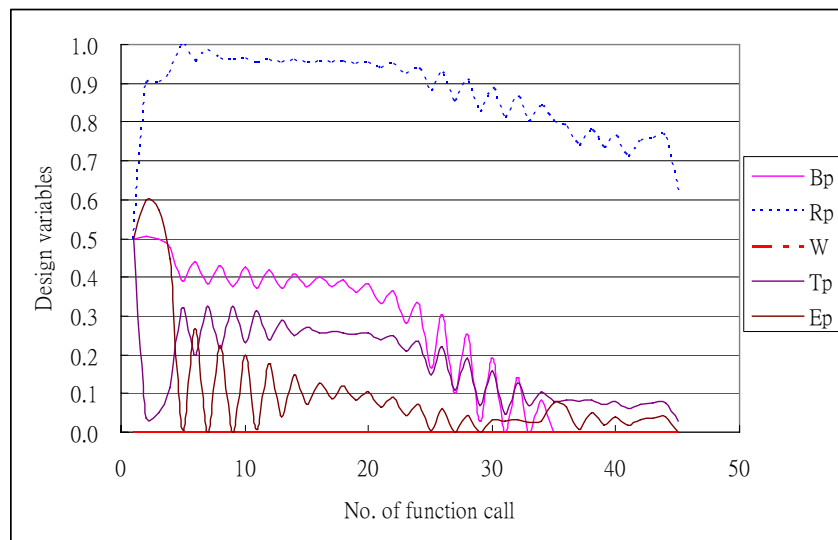


圖 6 設計變數 normalized 值的搜尋履歷

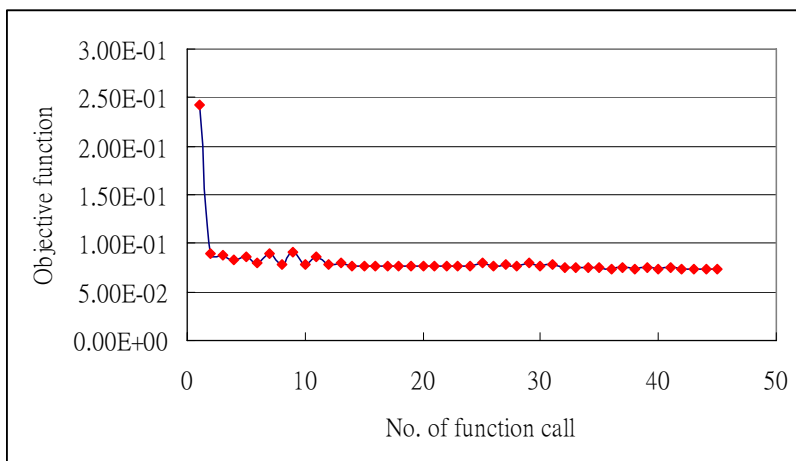


圖 7 目標函數(晶圓表面不平坦度)的履歷

表3 設計變數初始值和最佳值下之晶圓表面不平坦度的比較

設計變數	初值	最適化值
Bp	0.006897	0.003448
Rp	0.8	0.89776
W	0.0	0.0
Tp	1.397	0.738706
Ep	35.62228	2.29655
目標函數	0.2422	0.07388

肆、結論

經由本文所建立的模式模擬和分析，得到以二次搜尋最佳化方法來搜尋目標函數最小時的最佳設計變數組合，其中設計變數包括載具膜局部背壓、維持環負荷、晶圓-維持環間距、研磨墊厚度和彈性係數等五個製程參數，目標函數為晶圓表面不平坦度。結果發現當載具膜局部背壓、維持環負荷分別為 0.003448MPa 和 0.89776MPa、晶圓-維持環間距為 0.0mm、研磨墊厚度為 0.738706mm、研磨墊彈性係數為 2.29655MPa 時，最小的晶圓表面不平坦度為 0.07384。另比較最佳加工條件下和初始加工條件下之晶圓表面不平坦度(0.2422 和 0.07384)，改善程度達到 69.51%。

伍、參考文獻

1. Runnels, S. R. and P. Renteln, 1993, "Modeling the Effect of Polish Pad Deformation on Wafer Surface Stress Distributions during Chemical-Mechanical Polishing," Dielectric Sci. Technol., pp.110-121.
2. Srinivasa-Murthy, C., D. Wang, S. P. Beaudoin, T. Bibby, K. Holland, T. S. Cale, 1997, "Stress Distribution in Chemical-Mechanical Polishing," Thin Solid films, Vol.308, pp.533-537.
3. Wang, D., J. Lee, K. Holland, T. Bibby, S. Beaudoin, and T. Cale, 1997, "von Mises Stress in Chemical-Mechanical Polishing Processes," J. Electrochem. Soc., Vol.144, No.3, pp.1122-1127.
4. Lin, Y. Y. and S. P. Lo, 2004, "A Study of A Finite Element Model for Chemical Mechanical Polishing Process," Int. J. Adv. Manuf. Technol., Vol.23, pp.644-650.
5. Lin, Y. Y. and S. P. Lo, 2003, "A Study on the Stress and Nonuniformity of the Wafer Surface for the Chemical Mechanical Polishing Process," Int. J. Adv. Manuf. Technol., Vol.22, pp.401-409.
6. 吳建立，「積體電路平坦化製程化學機械研磨法之研究」，國立台灣科技大學機械工程技術研究所，民國八十七年。
7. Chiu, J. T., **Y. Y. Lin**, B. Y. Wu and S. P. Lo, 2008, "Modeling and Optimization of Chemical Mechanical Polishing Process," 第二十五屆中國機械工程學會全國學術研討會，彰化、大村，大葉大學。
8. **Lin, Y. Y.**, S. P. Lo, S. L. Lin and J. T. Chiu, 2008, "A Hybrid Model Combining Simulation and Optimization in Chemical Mechanical Polishing Process", Journal of Materials Processing Technology, Vol. 202, pp.152-pp.164. (SCI, EI)
9. Rao, S. S., 1989, "The Finite Element Method in Engineering," Pergamon Press.
10. IMSL Math/Library, 2001, "Fortran subroutine for mathematical applications," Visual Numerics Inc., Boston.

