

# 發展化學機械研磨製程之二維原子有限元素模式模

## 擬圓形刀鼻鑽石研磨粒之切削行為

林有鎰<sup>1</sup> 邱進東<sup>2</sup> 羅仕鵬<sup>3</sup>

<sup>1,3</sup> 德霖技術學院，機械工程系教授

<sup>2</sup> 德霖技術學院，創意產品設計系副教授

### 摘要

本文考慮在研磨過程中，切屑厚度比研磨粒小很多，又在相當小的進給尺度下，將研磨粒視為直線作用於銅工件上而建立了包含非線性彈簧及阻尼元素的二維原子有限元素模式。模擬過程為將圓形刀鼻鑽石研磨粒固定在研磨墊上，下壓至固定深度(=3.7 Å)，再以 300 m/s 的速度橫移進行含銅金屬層晶圓(銅金屬層，稱為銅工件)的研磨切削，來移除銅工件原子，藉此探討二維鑽石研磨粒形狀的影響。結果顯示鑽石研磨粒和銅工件一開始並無接觸，因此切削力和下壓力皆為零；當鑽石研磨粒逐步下壓，切削力和下壓力逐步增加；而當研磨粒開始以 300 m/s 的速度橫移產生研磨切削行為，切削力和下壓力隨著時間的經過，逐漸增加；當切削過程即將結束時，切削力和下壓力逐漸減少。

關鍵字：化學機械研磨製程、銅工件、圓形刀鼻鑽石研磨粒、二維原子有限元素模式

# Developing a Two-Dimensional Atomistic FE Model to Study the Cutting Behavior of a Round-Nose Diamond Particle in CMP process

Yeou-Yih Lin<sup>1</sup>   Jinn-Tong Chiu<sup>2</sup>   Ship-Peng Lo<sup>3</sup>

<sup>1,3</sup> Professor, De Lin Institute of Technology, Department of Mechanical Engineering

<sup>2</sup> Associate Professor, De Lin Institute of Technology, Department of Creative Product Design

## Abstract

In this paper, during the grinding process in CMP, the chip thickness is less than an abrasive particle, and the particle can be regarded to act on the copper workpiece linearly because of a significant small feed, a two-dimensional atomic finite element model with nonlinear spring-damping elements was established to investigate the cutting behavior of a round-nose diamond particle under the condition that it is fixed on the pad to polish the wafer possessed a copper metal layer (i.e. copper workpiece). The results showed that at the beginning, the diamond particle doesn't contact with the copper workpiece, therefore, both the cutting force and down-pressed force are zero. When the particle moves horizontally with a speed of 300 m/s, the forces increase gradually with time. The forces gradually decrease while the cutting process is finished.

**Keywords:** CMP, copper workpiece, round-nose diamond particle, two-dimensional atomistic finite element model

## 壹、緒論

化學機械研磨(CMP)製程是以化學研磨液氧化晶圓表面、軟化表層，並利用研磨墊與晶圓間的機械式研磨拋光，將晶圓上凹凸起伏的介電層或金屬層(本文針對銅金屬層，通稱為銅工件)加以平坦化。它是由晶圓承載器、載具膜、研磨墊和研磨平台組合而成，如圖 1 所示。由於線寬縮小和元件密集度增加，微影曝光解析度需求相對增加，導致光學成像景深也有較高的限制，因此對平坦化有極高的要求，使得 CMP 製程成為晶圓平坦化的主流製程。以往研究者多集中在建立巨觀的分析模式，由於半導體製程愈來愈趨近於奈米級，本文藉由原子有限元素模擬來填補這個級距，深入了解奈米級 CMP 製程的變形機制。

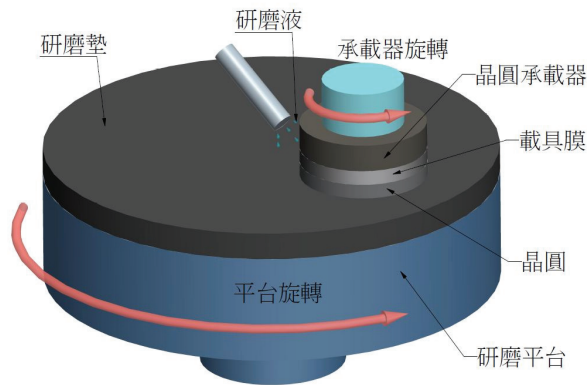


圖 1 化學機械研磨製程示意圖

由以上說明可知當半導體製程的尺度進入奈米級時，物質是由一顆顆不連續的分子或原子組成，尺寸約在原子或奈米等級，若以傳統的連體力學等巨觀方法研究，許多變形機制都將失效。為了瞭解奈米級 CMP 製程的變形機制的特性，理論分析和研究是必要的。

Inamura 等[1][2]將原子視為節點，以原子間的 Morse 勢能結合原子之作功，構成原子的總能量；以此為出發點，逐步推導出原子模式適用的有限元素法。他們以兩種不同的原子 Morse 勢能，模擬得到在切屑形成過程中，切削力和勢能隨著刀具移動的變化歷程。Inamura 等[3]更進一步導入權函數的觀念，推導出原子模式和連體模式之間的位移、應變和應力的關係，而得到工件的應變與應力分佈。Jeng 等[4]利用靜態原子模擬，觀察單一尖點(asperity)的機械接觸行為。結果顯示不同界面的接觸面積和接觸負載與小界面的 Hertz 連續模式相符合，且此模式預測的接觸面積和接觸負載和在彈塑和塑性區域以連體理論預測的相符合。Chiu 等[5]為了讓粒子能快速到達平衡位置避免過度震盪，在彈簧元素裡導入阻尼力，構成非線性彈簧和阻尼元素之原子有限元素法。它可以有效地進行微觀暫態過程的分析，並且發展出了一個二維銅薄膜微結構受單軸拉伸之模式，探討不同薄膜厚度的尺寸效應的影響和空孔缺陷對奈米薄膜拉伸的影響。

Kondo 等[6]的研究結果發現在 CMP 製程中，以研磨粒固定在研磨墊的方式來進行晶圓拋光，其凹陷(dishing)較不明顯，拋光品質較傳統 CMP 方式為佳，本文據此發展出應用於 CMP 製程中圓形刀鼻鑽石研磨粒切削模擬的二維原子有限元素法，來探討圓形刀鼻鑽石研磨粒的切削行為。

## 貳、理論基礎

### (1) 物理模式

根據 Kondo 等[6]研究顯示在 CMP 製程中，以研磨粒固定在研磨墊的方式來進行晶圓拋光，發現其凹陷(dishing)較不明顯，拋光品質較傳統 CMP 方式為佳，因此本文考慮在 CMP 製程中，將鑽石研磨粒固定在研磨墊上。圖 2 為 CMP 研磨過程中，晶圓和研磨墊的相對運動示意圖。對研磨墊表面上之鑽石研磨粒 A 而言，其相對速度  $\vec{V}$  為

$$\vec{V} = \vec{V}_p - \vec{V}_w \quad (1)$$

式中， $\vec{V}$  為 A 對於晶圓的相對速度， $\vec{V}_p$  為該點在研磨墊上的速度， $\vec{V}_w$  為該點在晶圓上的速度。

$$\begin{aligned} \vec{V}_p &= \vec{\omega}_p \times \vec{R}_p \\ \vec{V}_w &= \vec{\omega}_w \times \vec{R}_w \end{aligned} \quad (2)$$

式中， $\vec{\omega}_p$  為研磨墊轉速， $\vec{\omega}_w$  為晶圓轉速， $\vec{R}_p$  為 A 到研磨墊中心的距離， $\vec{R}_w$  為 A 到晶圓中心的距離。

將(2)式代入(1)式，則

$$\begin{aligned} \vec{V} &= \vec{\omega}_p \times \vec{R}_p - \vec{\omega}_w \times \vec{R}_w \\ &= \vec{\omega}_p \times \vec{R}_{wp} - (\vec{\omega}_w - \vec{\omega}_p) \times \vec{R}_w \end{aligned} \quad (3)$$

式中， $\vec{R}_{wp}$  為研磨墊中心到晶圓中心的距離。

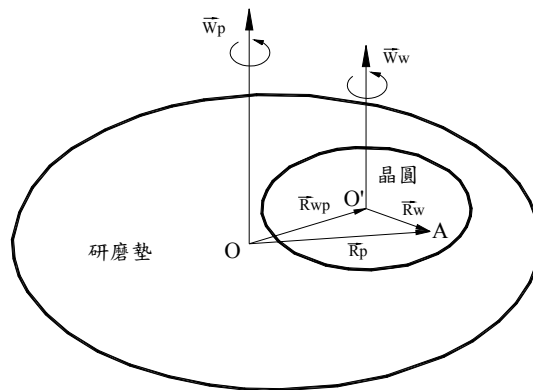


圖 2 晶圓和研磨墊相對運動示意圖

假設研磨墊與晶圓具有相同的轉速與方向，即  $\vec{\omega}_p = \vec{\omega}_w$ ，則由(3)式知 A 的相對速度  $\vec{V}$  簡化為定值的  $(\vec{\omega}_p \times \vec{R}_{wp})$ 。考慮在鑽石研磨粒切削時，切屑厚度較研磨粒的尺寸小很多，因此簡化為

一二維模式，又由於在相當小的進給尺度下，可以將鑽石研磨粒視為直線作用於銅工件上而發展出應用於 CMP 製程中鑽石研磨粒切削模擬的二維原子有限元素法，模擬過程為將鑽石研磨粒下壓至固定深度，再以一定的速度橫移產生研磨切削行為，來移除銅工件原子，藉此探討二維鑽石研磨粒的切削行為，如圖 3 所示。

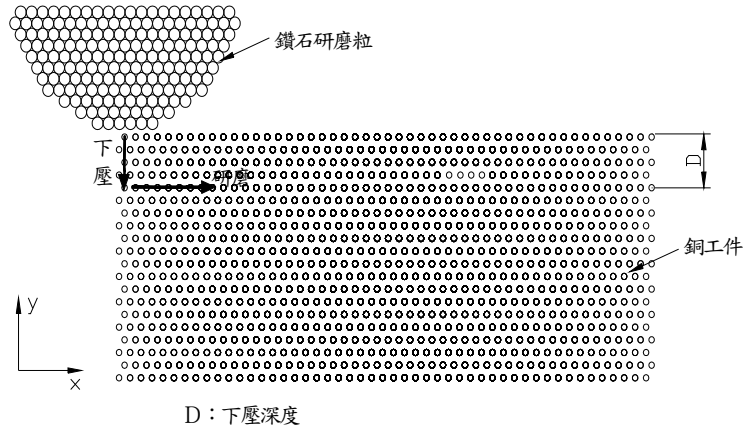


圖 3 二維鑽石研磨粒下壓和研磨示意圖

## (2) 勢能函數

本文採用二體勢能之 Morse 勢能函數來描述銅原子間的交互作用力，其定義如下：

$$\Phi(r) = D \left\{ e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right\} \quad (4)$$

式中，D 為結合能， $\alpha$  為材料參數，r 為第 j 顆原子對於第 i 顆原子的距離， $r_0$  為平衡距離，以上參數，如表 1 所示。

表 2 Morse 勢能函數之參數

參數	銅-銅
D (eV)	0.3429
$\alpha$ ( $\text{\AA}^{-1}$ )	1.3588
$r_0$ ( $\text{\AA}$ )	2.87

將 Morse 勢能函數微分，並取其負值而得到分子間作用力，表示如下：

$$F(r) = -\frac{\partial \Phi(r)}{\partial r} = -D \left\{ -2\alpha e^{-2\alpha(r-r_0)} + 2\alpha e^{-\alpha(r-r_0)} \right\} \quad (5)$$

以上 Morse 勢能函數和分子間作用力之關係，如圖 4 所示。

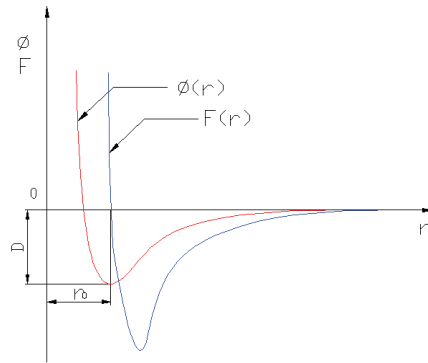


圖 4 Morse 勢能函數和分子間作用力之關係示意圖

如圖 4 所示，Morse 勢能函數是由兩項引力所組成，一項為斥力項，一項為吸力項，由圖中可以看出當兩顆原子逐漸接近時，開始感受到彼此存在而會產生吸力，但太過接近時會產生強大的排斥力量，圖中的最低點是能量的最小值，此點即為吸力與斥力的轉折點，也是原子在沒有外力的平衡點，此時  $r_{ij} = r_0$ 。當粒子與粒子間的距離大於某一距離時其值便迅速的趨近於零，因此我們可以定義截斷勢能如下：

$$\Phi_c(r_{ij}) = \begin{cases} \Phi(r_{ij}), r_{ij} \leq r_c \\ 0, r_{ij} > r_c \end{cases} \quad (6)$$

上式可作為 CMP 製程鑽石研磨粒切削的破壞準則， $r_c$  約為 2.5 倍的  $r_0$ 。同時，為了方便與有限元素法結合，將(5)式無因次化，以簡化計算及方便作分析，如表 2 所示。

表 2 無因次化物理參數

距離	作用力	時間步階	速度	質量
$r^* = \frac{r}{r_0}$	$F^* = F \frac{r_0}{D}$	$dt^* = dt \sqrt{\frac{D}{mr_0^2}}$	$v^* = v \sqrt{\frac{m}{D}}$	$m^* = 1$

### (3) 有限元素模型

本文的二維有限元素模型之非線性彈簧及阻尼元素如圖 5 所示，其中 i 原子與 j 原子位於節點上，原子的質量以集中質量模擬，原子間的作用力以非線性彈簧及阻尼模擬。

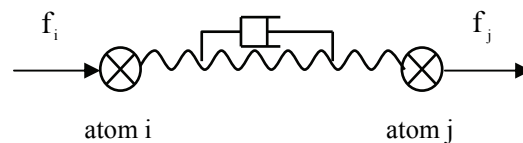


圖 5 單自由度之質量、阻尼及彈簧元素

把其中一原子固定，則單自由度之彈簧阻尼質量系統平衡方程式可以利用 d'Alembert's 定理表示為：

$$m\ddot{r}_{ij} + c\dot{r}_{ij} + f_{int}(r_{ij}) = f_{ext} \quad (7)$$

式中， $m$  為原子質量，位於節點中心； $c$  為阻尼係數， $f_{int}(r_{ij})$  為原子間作用力，與原子間距離  $r_{ij}$  有關； $f_{ext}$  為作用於節點的外力。

原子 i 與原子 j 的作用力  $f_{int}(r_{ij})$  以非線性彈簧及阻尼表示，為原子間距離函數，如下：

$$f_{\text{int}}(r_{ij}) = \begin{cases} \frac{\partial \Phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}}, & r_{ij} \leq r_c \\ 0, & r_{ij} > r_c \end{cases} \quad (8)$$

由上式可求得非線性彈簧係數，並可以完整的定義原子與原子間的吸引力，同時可以給定壓縮與伸長時斷裂的伸長應變，即材料的破壞準則，可以完整的模擬(6)式中的原子間的截斷長度。

爲了讓原子能快速的到達平衡位置避免過度震盪，在(7)式中引進阻尼力。在臨界阻尼時，阻尼係數  $c$  可以表示爲：

$$c = 2m\omega\xi \quad (9)$$

式中， $\omega$  爲自然頻率， $\xi$  爲阻尼比，在臨界阻尼時， $\xi = 1$ 。

將元素的質量、阻尼及勁度矩陣組合成整體座標系統有限元素模型之控制方程式，如圖 6 所示，圖 6 爲 FCC 晶格之一切面，原子間的作用力均以非線性彈簧及阻尼模擬。

$$M\ddot{x} + C\dot{x} + F_{\text{int}}(x) = F_{\text{ext}} \quad (10)$$

式中， $M$  爲整體座標系統質量矩陣， $C$  爲整體座標系統阻尼矩陣， $F_{\text{int}}(x)$  爲整體座標系統內力， $F_{\text{ext}}$  爲整體座標系統外力。

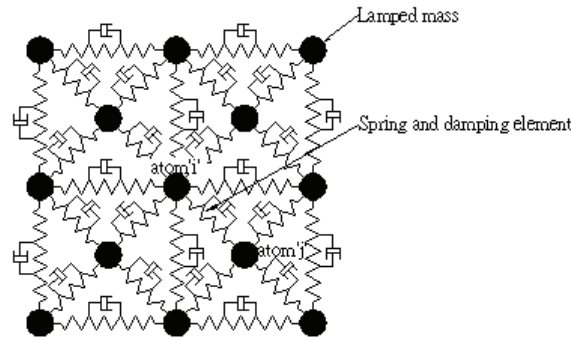


圖 6 二維模型示意圖

#### (4)控制方程式與求解過程

控制方程式可表示爲

$$M\ddot{x}(t) + F(x, \dot{x}) - P(x, t) = 0 \quad (11)$$

式中， $F_e(x, \dot{x}) = \int_{V_e} B^t \sigma(\varepsilon, \dot{\varepsilon}) dV_e$  爲非線性部分，主要來自於材料及幾何非線性、 $x, \dot{x}, \ddot{x}$  爲位移、

速度及加速度向量、 $M$  爲質量矩陣、 $\sigma_{ij}$  爲 Cauchy 應力、 $n_i$  爲邊界上的單位法線向量、 $\varepsilon, \dot{\varepsilon}$  爲應變與應變率、 $P(x, t)$  爲外力所導致的非線性項。

(11)式同時滿足的邊界條件包括

外力(traction)邊界條件

$$\sigma_{ij} n_i = t_j(t) \quad (12)$$

位移邊界條件

$$x_i(X_\alpha, t) = D_i(t) \quad (13)$$

接觸邊界條件

$$(\sigma_{ij}^+ - \sigma_{ij}^-)n_i = 0 \quad (14)$$

將(11)式離散化後可表示為

$$Ma^n + Cv^n + Kd^n = F^{ext} \quad (15)$$

式中， $M$  為質量矩陣、 $C$  為阻尼矩陣、 $K$  為勁度矩陣、 $F^{ext}$  為外力、 $a^n, v^n, d^n$  為時間間距  $n$  時的加速度、速度及位移。

利用外顯式(explicit)法針對(15)式進行求解，求解過程如下：

(15)式可整理為

$$Ma^n = P^n - F^n + H^n \quad (16)$$

式中， $M$  為對角項的質量矩陣， $P^n$  為外力與物體力， $F^n$  為應力分離(divergence)向量， $H^n$  為沙漏阻力(hourglass resistance)。

求解時間步驟  $t^{n+1}$  採用中央插分法，過程如下：

$$a^n = M^{-1}(P^n - F^n + H^n) \quad (17)$$

$$v^{n+\frac{1}{2}} = v^{n-\frac{1}{2}} + a^n \Delta t^n \quad (18)$$

$$u^{n+1} = u^n + v^{n+\frac{1}{2}} \Delta t^{n+\frac{1}{2}} \quad (19)$$

式中， $\Delta t^{n+\frac{1}{2}} = \frac{(\Delta t^n + \Delta t^{n+1})}{2}$ ， $v, u$  分別為全域座標系中的節點速度與位移向量。

將位移增量向量加至初始幾何位置向量，可得  $t^{n+1}$  時之幾何位置：

$$x^{n+1} = x^0 + u^{n+1} \quad (20)$$

## 參、結果與討論

### (1) 變形歷程

圖 7 為圓形刀鼻形狀之二維鑽石研磨粒對工件切削的變形歷程。為執行有限元素的接觸處理，本文將鑽石研磨粒視為實體模式(solid model)，在銅工件原子經過平衡階段後，將鑽石研磨粒下壓至固定深度(=3.7 Å)，再以 300 m/s 的速度橫移產生研磨切削行為，移除銅工件原子，以此方式模擬二維模式的研磨粒的切削行為。圖 7 的時間經過表 2 的無因次化處理。由圖中可知當時間小於 80 時，銅工件原子處於平衡階段；當時間等於 80 時，銅工件原子結束平衡階段；鑽石研磨粒開始逐步下壓，當時間等於 89 時，下壓距離達至 3.7 Å 的深度，研磨粒開始以 300 m/s 的速度橫移產生研磨切削行為，移除銅工件原子；當時間超過 169 以後，切削過程即將結束。



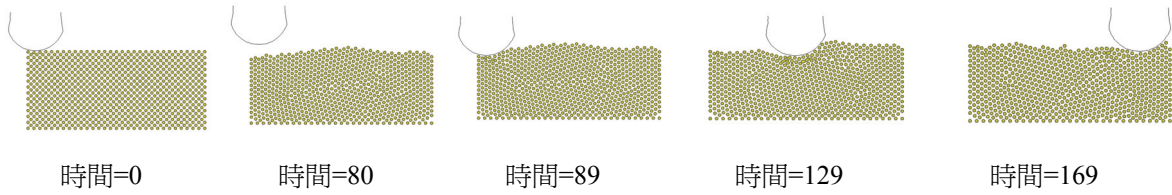


圖 7 圓形刀鼻形狀之二維鑽石研磨粒對工件切削的變形歷程

## (2) 作用力歷程

圖 8 為圓形刀鼻形狀之二維鑽石研磨粒對工件切削的切削力( $F_x$ )和下壓力( $F_y$ )歷程。圖 8 的切削力、下壓力和時間皆經過表 2 的無因次化處理。由圖中可知當時間小於 80 時，鑽石研磨粒和銅工件並無接觸，因此切削力和下壓力皆為零；當時間等於 80 時，鑽石研磨粒開始逐步下壓；當時間等於 89 時，下壓距離達到  $3.7 \text{ \AA}$  的深度，切削力和下壓力逐步增加；當時間超過 89 後，研磨粒開始以  $300 \text{ m/s}$  的速度橫移產生研磨切削行為，此時由於銅工件原子與鑽石研磨粒反覆進行接觸和分離，使得切削力和下壓力反覆震盪，當以多項式擬合進行分析時，發現切削力和下壓力隨著時間的經過，逐漸增加；當時間超過 169 後，切削過程即將結束，此時切削力和下壓力逐漸減少。

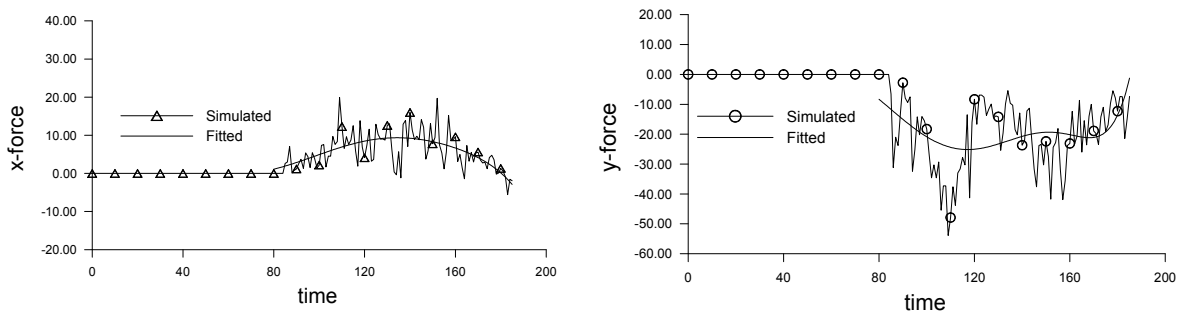


圖 8 圓形刀鼻形狀之二維鑽石研磨粒對工件切削的作用力歷程

## 肆、結論

經由本文所建立的化學機械研磨製程二維原子有限元素模式的模擬和分析，得到以下結論：

1. 建立包含非線性彈簧及阻尼元素之二維原子有限元素模式，藉此探討圓形刀鼻鑽石研磨粒的切削行為。
2. 圓形刀鼻鑽石研磨粒和銅工件一開始並無接觸，因此切削力和下壓力皆為零；當鑽石研磨粒逐步下壓，切削力和下壓力逐步增加；而當研磨粒開始以  $300 \text{ m/s}$  的速度橫移產生研磨切削行為，切削力和下壓力隨著時間的經過，逐漸增加；當切削過程即將結束時，切削力和下壓力逐漸減少。

## 伍、致謝

感謝國科會提供經費贊助(NSC 98-2221-E-237 -005 -)。

## 陸、參考文獻

- [1] Inamura, T., H. Suzuki and N. Takezawa, 1991, "Cutting Experiments in a Computer Using Atomic Models of a Copper Crystal and a Diamond Tool," *Int. J. Jpn. Soc. Precis. Eng.*, Vol. 25, No.4, pp.259-pp.266.
- [2] Inamura, T. and N. Takezawa, 1992, "Atomic-Scale Cutting in a Computer Using Crystal Models of Copper and Diamond", *Annals of the CIRP*, Vol.41, No.1, pp.121-pp.124.
- [3] Inamura, T., N. Takezawa and Y. Kumaki, 1993, "Mechanics and Energy Dissipation in Nanoscale Cutting", *Annals. CIRP*, Vol.42, No.1, pp.79-82.
- [4] Jeng, Y. R., W. C. Kao and P. C. Tsai, 2007, "Investigation into the Mechanical Contact Behavior of Single Asperity Using Static Atomistic Simulations," *Applied Physics Letters*, Vol.91, pp.091904-1-pp. 091904-3.
- [5] Chiu, J. T., Y. Y. Lin, C. L. Shen, S. P. Lo and W. J. Wu, 2008, "Atomic-Scale Finite Element Model of Tension in Nano-Scale Thin Film," *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, Vol.37, pp.76-pp.82.
- [6] Kondo, S., N. Sakuma, Y. Homma, Y. Goto, N. Ohashi, H. Yamaguchi and N. Owada, 2000, "Abrasive-Free Polishing for Copper Damascene Interconnection," *J. Electrochem. Soc.*, Vol.147, pp.3907-pp.3913.