DOI:10.11918/j.issn.0367-6234.201705160

化学机械研抛过程流体和磨粒分布特性仿真

翟文杰,王翱翔

(哈尔滨工业大学 机电工程学院,哈尔滨 150001)

摘 要:为深入理解化学机械抛光过程中的摩擦磨损机理,仿真研究了不同工况对抛光作用的影响规律.建立考虑多相流和 离散相的三维 CFD 模型,研究不同工况下晶片和抛光垫间抛光液的速度和压力分布以及抛光磨粒的分布规律.结果表明:膜 厚越小,抛光垫和晶片的转速越大,磨粒的分布密度越小.对流体速度和压力分布规律以及磨粒分布特性进行仿真分析,研究 抛光过程中磨粒对晶片表面的动压作用过程.用疲劳断裂能量守恒理论,建立可定量分析各种工况下材料去除率的预测模 型,采用 Matlab 软件对去除率模型进行仿真计算,得到不同工况下碳化硅晶片的去除率曲线.结果表明,抛光垫转速越大,膜 厚越小,材料去除率越大,但去除率随着抛光的进行呈现减小的趋势.相比抛光垫转速对去除率的影响,膜厚对去除率的影响 较小.

关键词:化学机械抛光;CFD 仿真;膜厚;磨粒分布;材料去除率

中图分类号:TU375.2 文献标志码:A 文章编号:0367-6234(2018)01-0029-07

Modeling and simulation for the distribution of fluid and slurry particles in chemical mechanical polishing

ZHAI Wenjie, WANG Aoxiang

(School of Mechatronics Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

Abstract: To fully understand the friction and wear mechanism of chemical mechanical polishing process, the effects of different processing conditions on the polishing process were simulated. Three-dimensional CFD model considering multiphase flow and discrete phase was established to obtain the speed and pressure distribution of the polishing liquid as well as that of the polishing abrasive particles between wafer and polishing pad under different processing conditions. It is found that the abrasive particle distribution density is smaller when the film thickness is smaller, and the greater the speeds of the polishing pad and wafer, the smaller the particle distribution density. Based on the distribution characteristics of fluid velocity, pressure and polishing patricles, a model of material removal rate(MRR) was established, and the dynamic pressure caused by flowing polishing abrasive on the surface asperity of the wafer during polishing process was analyzed. By applying the energy-balance fracture theory, the MRR prediction model was established which could be used quantitatively for all kinds of materials. For silicon carbide polishing, its MRR curve under different processing conditions was obtained by Matlab programing. It is found that the MRR is greater when the polishing pad speed is greater and the gap film thickness is smaller. The MRR decreases as polishing continues, and the effect of film thickness on the removal rate is smaller compared with that of the polishing speed.

Keywords: chemical mechanical polishing; CFD simulation; film thickness; abrasive particle distribution; material removal rate

在化学机械抛光过程中,流体特性和磨粒分布 是影响抛光效率的重要因素之一,很多学者展开了 这方面的研究. Terrell 和 Higgs^[1]通过实验和数值模 拟,研究了抛光液的诸多物理特性对抛光作用的影 响.目前,多数抛光过程 CFD 仿真都是基于流体单 相的二维模型^[2],或单相三维 CFD 模型来研究晶片 抛光过程中的流体特性^[3]. 但这些 CFD 模型都没有

收稿日期: 2017-05-28

基金项目:国家自然科学基金(51475119)

作者简介: 翟文杰(1964—),男,教授,博士生导师

通信作者: 翟文杰, zhaiwenjie@ hit.edu.cn

考虑到抛光液中磨粒的分布情况,即忽略了磨粒对 抛光作用的影响.有研究表明,材料去除率随着晶 片和抛光垫之间的磨粒浓度增加而增大^[4].Basim 等^[5]指出,小尺寸磨粒产生磨削力有助于保证加工 表面的平整性和均匀性.Resem 等^[6]研究了大粒径 磨粒对研抛表面的刮擦作用形式.Levert 和 Korach^[7]采用摩擦学理论研究了磨粒浓度和粒径大 小对研抛过程中摩擦因数的影响.但是,以上研究 都是基于很多假设下的简化模型进行的理论分析, 难以充分理解化学机械研抛作用机理.

目前,在抛光过程中,晶片和抛光垫间的流体和

磨粒的运动状态和特性可以采用二相流体模型进行 仿真研究^[8-9].应用 CFD 仿真软件研究抛光液的流 体和磨粒分布特性,有助于进一步研究化学机械研 抛的作用机理.本文建立考虑多相的三维 CFD 模 型,分别观察抛光液的流体特性和跟踪磨粒的运行 轨迹,并应用疲劳断裂能量守恒理论,建立可定量分 析各种工况下的材料去除率预测模型,对不同工况 下碳化硅晶片的去除率变化规律进行研究.

1 抛光过程 CFD 仿真

1.1 三维 CFD 仿真模型的建立

建立了简化的化学机械抛光模型,其主要由载 具、晶片、抛光液、抛光垫、抛光盘、注入口等部分组 成,如图1所示.晶片和抛光垫都以相同的速度逆 时针旋转,抛光液从注入口注入到抛光垫上,由于抛 光垫的旋转,沿着垫面流入抛光间隙产生研抛作用. 模型尺寸参数见表1.



图1 化学机械抛光模型

Fig.1 Chemical mechanical polishing model diagram

表1 抛光垫与晶片参数

	Tab.1	Polishing	pad and	wafer]	parameters	mm	
D _p	$D_{\rm c}$	D_{w}	L_1	L_2	h	$h_{ m c}$	
00	90	50	100	100	0.04	0.3	

注: D_p 为抛光垫直径, D_c 载具直径, D_w 为晶片直径, L₁ 为抛光垫 中心与入射口中心间距, L₂ 为抛光垫中心与晶片中心间距, h 为抛光垫与晶片间距, h_c 为载具与抛光垫间距.

采用 Ansys Fluent 软件进行仿真模拟,综合采 用了多相流模型、离散相模型和多重滑移面模型. 由于抛光液中具有水、空气、磨粒3相,采用多相流 模型来研究抛光液的流体特性;多相流模型又用到 了自由面流动模型(VOF),包括水和空气两相. VOF 模型是基于欧拉-欧拉方法,在 VOF 模型中把抛光 液当做是瞬态和开放自由的流体.在自由面流动条 件下,两相混合从入口进入到抛光垫表面,最终流动 到抛光区域,进入晶片和抛光垫之间的间隙.同时, 采用离散相模型(DPM),磨粒作为离散相颗粒以同 样速度从入口喷射到抛光垫表面,进入抛光区域,一 起产生研抛作用.最后,结合多重滑移面模型,模拟 抛光垫和晶片的自转运动产生的相对滑移,研究在 整个抛光过程中,系统在瞬态以及稳态下的流场和 磨粒分布情况.

1.2 CFD 仿真网格划分和边界条件设定

基于以下假设建立仿真模型:首先认为抛光垫 和晶片表面是平整的刚性表面,水和磨粒的混合液 代替抛光液,并且水和粒子以相同的流率进入到研 抛盘表面.图2(a)是模型的二维视图,四周的壁面 围绕形成封闭空间,从而有利于流场域的仿真计算 和仿真结果的观察.由于抛光垫与晶片间的间距为 40 μm,在这种微米级的尺度下进行网格划分是困 难的,采用分区域划分网格.另外,为了充分地反映 出间隙间流体的分布情况,对间隙采用了4层网格 划分,其他部分保证网格划分层数在10层以上,如 图2(c)所示.采用 Cooper 的方式进行划分,最终得 到比较好的网格质量,网格的最大偏斜率为0.75,网 格总数为200 000,整体网格划分如图2(b).



设定注入口为速度入口边界,抛光垫、晶片、载 具为旋转移动壁面边界,其他默认为静壁面边界,其 边界条件设定如图3所示.



1.3 CFD 仿真结果与讨论

1.3.1 压力分布

静压的大小是流体的压力和外部单位载荷共同 作用的结果,图4所示是抛光仿真过程中抛光垫和 晶片之间区域的流体在6、10、14、18 s时刻静压的 变化云图.由图4可知,抛光开始时是1个非稳态过 程,静压是随时间变化的,在18 s的时刻,静压不再 变化,抛光过程开始进入稳定阶段.



Fig.4 The pressure distribution during different moment

1.3.2 速度分布

速度云图如图 5 所示,分别为晶片表面、抛光垫 表面和间距中心面的速度云图.由于采用非滑移边 界类型,抛光垫表面的流体速度等于抛光垫的速度 为 2π r_p w_p,同样,晶片表面流体速度和晶片的转动 速度相一致,为 2π r_w w_w,均呈现出速度沿径向由圆 心向外边依次递增的特点.而抛光垫和晶片中心层 间的速度呈现非规律分布,与晶片表面流场的复杂 性相吻合,但总体上液膜内部流场比表面边缘流场 的速度分布更加均匀,跨度也更小,这为流体把速度 传递给离散的磨粒创造了有利的环境.





Fig.5 The velocity distribution between the different positions of clearance

图 6 为不同膜厚和抛光垫转速下间隙间的抛光 液的速度大小. 由图 6 可以发现, 抛光垫的转速对 液模的速度影响较大, 液膜中抛光液的速度随着抛 光垫转速的增大而增大. 膜厚对抛光液流速的影响 较小, 抛光垫转速相同时, 呈现出膜厚越小液膜中抛 光液的流速越大的规律.



Fig.6 The polishing liquid velocity distribution under different working conditions

1.3.3 磨粒分布

当抛光液进入抛光垫和晶片表面时,间隙间的 磨粒数目逐渐增大,随着抛光过程持续进行,抛光间 隙间的磨粒浓度也开始稳定下来,图7所示为不同 时刻磨粒分布.



图 7 不同时刻抛光盘表面磨粒分布

Fig.7 The particle distribution at different moment

磨粒的运动和分布规律是影响去除率大小和表 面平整性的决定性因素,由图 8(a)可以看出,磨粒 的浓度随着抛光的进行逐渐的升高,在10 s 时略有 减小趋势,基本达到了稳定状态,也进一步解释了化 学机械抛光过程中摩擦力在抛光初期一段时间达到 稳定状态.图 8(b)所示为在 20 μm 膜厚下,且抛光 垫和晶片转速均为 60 r/min 时,晶片沿 x 轴方向各 截面上的磨粒浓度分布值,可以看到,间隙间磨粒呈 现非均匀分布,靠近晶片中心的磨粒浓度比晶片边 缘的磨粒浓度高,这一规律解释了晶片抛光表面从 中心到边缘去除率总是存在差异性.

另外,随着工况参数的改变,间隙间粒子浓度也 发生变化,对各种工况参数进行仿真,结果见图9. 由图9可知间隙内磨粒数随着膜厚和转速的变化情况.根据流体动压理论,当抛光液的流率、抛光垫和 晶片的转速一定时,增加载荷会导致间隙膜厚减小. 由图9(a)、(b)可知,抛光垫和晶片转速均为 30 r/min时,40 μm 膜厚下总的磨粒数是膜厚20 μm 下总磨粒数的两倍还多,这说明载荷的大小对磨粒 数的影响很大;但在小膜厚间隙时,晶片和抛光垫 转速改变对磨粒数的影响非常小.大膜厚下,当抛 光垫的速度倍增时,磨粒数调显减小;而晶片的转速 (c)、(d)所示抛光垫和晶片转速均为60 r/min的工况,同样可以得出以上结论,即载荷较小(膜厚大)时,间隙内磨粒数多,且间隙间的磨粒数随盘或晶片转速的增大而减少,其中抛光垫转速的影响比晶片转速影响程度更大.





2 去除率仿真计算

2.1 材料去除率模型的建立

在化学机械抛光过程中,材料的去除主要有两 种方式产生:一种是晶片和抛光垫相互接触,挤压之 间的磨粒,直接利用磨粒的刮擦作用;另一种方式为 晶片和抛光垫没有直接接触,晶片和抛光垫之间存 在 20~40 μm 厚度的液膜,利用液膜中的动压,通过 磨粒的反复冲击来实现材料的去除. 然而,Stein 等^[10]和 Mahajan 等^[11]实验发现,抛光后的晶体表面 不存在刮擦的划痕和凹痕,这说明晶体表面材料的 去除不是刮擦的过程,而是液膜中磨粒的冲击作用.

如图 10(a) 所示, 一定工况下, 在晶片与抛光垫 间形成一层含有很多磨粒的液膜. 流动的抛光液裹 夹着磨粒随之运动. 由于待抛光晶片表面粗糙, 存 在很多微凸体, 当移动的磨粒以一定的速度通过晶 片粗糙面上的无数微凸体时, 便产生了动压作用. 表面微凸体在无数磨粒周期性交变动压力的作用下 产生破坏, 从而实现材料的去除. 图 10(b) 为所建立 的磨粒通过微凸峰时的动压作用模型. 其中磨粒形 状、粒径大小、晶片表面粗糙度、磨粒速度、液膜厚度 等相关参数如表 2 所示.



(b)去除率模型

图 10 磨粒和微峰间的动压作用模型

Fig.10 Hydodynamic model between abrasive and asperity

表 2 抛光垫与晶片尺寸参数

Tab.2 Polishing pad and wafer size parameters

a∕nm	<i>H</i> ∕nm	D∕nm	<i>L</i> /nm	$\mu / (\mathrm{mPa} \boldsymbol{\cdot} \mathrm{s})$	$V/(m \cdot s^{-1})$	<i>θ</i> ∕(°)
10	15	100	100	2.41	0.2~0.5	170

注: *a* 为粗糙面凸体高度,*H* 为磨粒与凸体间液膜厚,*D* 为粒径,*L* 为 计算区长度,*μ* 为抛光液黏度,*V* 为粒子速度,*θ* 为凸体顶角度.

上述模型磨粒的速度取决于流场中离散相磨粒的速度,可基于上一节多相流场仿真获得磨粒的速度,可基于上一节多相流场仿真获得磨粒的速度分布.每一个磨粒通过微凸体表面,产生一个瞬时动压,可以通过 CFD 仿真分析单个磨粒通过微凸体表面时的动压,获得一个周期的动压分布.图 11 分别为粒子在经过微凸体表面不同位置时动压分布 云图和动压分布曲线. 从图 11 可以看出,随着磨粒 位置的变化,微凸体上动压大小也在发生变化,并且 总是先增大后减小,存在一个峰值,而这个峰值往往 出现在磨粒与微凸体间距最近位置,并且当磨粒越 接近微凸体顶尖,动压强度峰值越高.故磨粒在通 过微凸体表面的整个周期内均产生动压,动压分布 在微凸体表面的各个位置,在微凸体顶尖处达到峰 值,此时微凸体在交变应力的作用下极易发生疲劳 破坏,因此材料的去除从微凸体的顶端开始发展到 微凸体的根部,从而实现表面光整的作用.







根据流体润滑理论,速度是影响流体动压大小 的重要因素.图 12 为磨粒以不同速度通过微凸体 顶点正下方时的动压分布和形变量大小.当磨粒通 过微凸体正下方时,在微凸体顶点位置产生最大的 动压,这时也产生最大的形变,且磨粒通过的速度越 大,产生的动压越大,形变越大,从而产生的疲劳破 坏越强.由于磨粒的速度主要受流场速度的影响, 故抛光垫和晶片转速对材料去除率的大小有很大的 影响,速度越大,材料的去除作用越强.

如图 13 为一个周期内,不同速度的磨粒通过整 个流场时微凸体顶点的动压分布和形变大小.可以 看出,顶点的动压基本呈现对称分布,随着磨粒位置 不同,对微凸体顶点的影响作用先增大后减小,这是 由于在磨粒的运动过程中,磨粒与微凸体的间隙先 减小后增大,故动压大小也呈现先增大后减小的规 律.结合动压和形变分布情况,便可以得出在一个 周期中,磨粒对微凸体顶点所传递的能量.



图 12 各工况下微凸体表面动压与形变曲线

Fig.12 Dynamic pressure and deformation curve on the micro convex body surface under different working conditions





2.2 材料去除率数值模拟

在化学机械抛光中,鉴于在晶片表面材料去除 主要由微凸体的疲劳破坏造成,本文采用疲劳断裂 能量守恒理论建立晶片表面的材料去除模型^[12-13], 并假设材料的疲劳破坏是在理想情况下产生的.上 文已经对微凸体的动压情况进行了分析,而微凸体 的顶尖由于受到最大的动压作用过程,故其是发生 疲劳破坏的首要部位.这里把动压作用的过程看作 是能量的输入,用来破坏晶体表面的结合能,从而达 到表面疲劳破坏的作用.

微凸体微分模型见图 14.



图 14 微凸体微分模型

Fig.14 Micro convex bodydifferential model

碳化硅的结合能为 99.8 eV,即 10⁻¹⁷ J,当受到 周期性动压作用,输入微凸体顶点的总能量大于碳 化硅的结合能时,碳化硅表面的稳定结构将被破 坏^[14],微凸体顶点将发生微观破坏,材料去除随之 发生.同时考虑到化学作用对晶片表面的影响,钝 化的晶片表面材料变软,碳化硅表面发生疲劳破坏 所需克服的结合能随之变小,因此微凸体所需获取 周期性的动压输入能量相应降低,更易实现稳定的 材料去除.

根据疲劳断裂能量守恒理论,材料断裂破坏的 稳定进行需要能量的持续输入,输入的能量被认为 消耗在两个方面:一方面是提供给表面能,用来形成 新的表面;另一方面是被塑性变形所消耗.一些材 料在发生断裂破坏之前会发生塑性变形从而消耗一 部分能量.在这里不考虑碳化硅晶片的塑性变形, 即输入的能量仅仅提供给新的表面的生成,这就意 味着随着断裂破坏的进行,输入的能量要远大于表 面能,抛光得以稳定进行.

当前,疲劳断裂能量守恒理论对于材料疲劳破 坏的具体过程没有详细的解释,但是可以借助这一 理论来解释粗糙表面的抛光过程.根据图 14 微凸 体的微分模型,可知新形成材料表面积为

 $S = 2 \cdot \Delta h \cdot \tan(\theta/2).$

设单位材料高度的去除时间为 t,基于疲劳断 裂能量守恒理论建立了材料的去除率模型为

$$t = \frac{2 \cdot R_s \cdot S}{f \cdot W_s},$$

$$t = \frac{2 \cdot R_s \cdot \int_0^h h \, \tan \frac{\theta}{2} \mathrm{d}h}{f \cdot W_s}.$$

式中:碳化硅的表面能 $R_s = 1400 \text{ mJ/m}^2, f = U/\xi$ 为 粒子通过的频率, $W_s = \sum_{j=1}^{m} \sum_{i=1}^{n} p_{i,j} \cdot \Delta x \cdot (d_{i,j} - d_{i-1,j})$ 为 周期动压输入能量, $\xi = 3v/n$ 为两相邻粒子间距,故 去除率为

$$\eta_{\rm MRR} = \sqrt{\frac{f \cdot W_s}{t \cdot R_s \cdot \tan (\theta/2)}}$$

根据上述去除率模型进行数值仿真模拟,将不同膜厚和转速情况下的磨粒数和磨粒速度带入去除 率模型中,得到最终的材料去除率曲线如图 15 所示.



图 15 各工况下材料去除率曲线



由于抛光垫和晶片的转速较小,故在速度较小 的流场中,材料的去除率也相对较小,保持在在纳米 的尺度,这与其他学者的实验结果差别不大.从 图 15可以看出,相同膜厚情况下,抛光垫转速越大, 材料去除率越大.因为抛光垫转速增大,磨粒的速 度随之增大,使得微凸体表面的动压以及形变增大, 材料的去除作用增强. 虽然转速的增大使得间隙内 磨粒数减小(见图9),但间隙内磨粒浓度变化不大, 因此对微凸体参与冲击形成动压的粒子数相差不 大. 从图 15 还可以看出, 间隙膜厚越小, 材料去除 率越大. 这是因为相同转速下,当膜厚越小,间隙内 磨粒浓度越大时,对微凸体施加作用的磨粒数越多, 同时,膜厚越小,对微凸体形成的动压力也增大.另 外,由图15还可以看出,抛光垫转速对去除率的影 响程度要高于膜厚对去除率的影响程度,说明抛光 垫转速对磨粒速度以及动压力的影响程度高于膜厚 减小对磨粒浓度和动压力的影响程度.

3 结 论

1)本文建立考虑多相流和离散相的三维 CFD 模型,研究了不同的工况下晶片和抛光垫间抛光液 的速度和压力分布以及抛光磨粒的分布规律.发现 膜厚越小,抛光垫和晶片的转速越大,磨粒的分布密 度越小.

2) 与抛光垫转速相比, 晶片转速大小对磨粒分 布的影响较小; 在较大膜厚情况下, 抛光垫转速对 磨粒分布的影响较为明显; 而较小膜厚时, 抛光垫转 速对磨粒分布的影响略小.

3)基于磨粒和流场的分布情况,建立了材料去 除模型,得到各工况下材料去除率曲线,可定量预测 各种工况下的材料去除率.

参考文献

- [1] TERRELL E J, HIGGS C F. Hydrodynamics of slurry flow in chemical mechanical polishing areview[J]. Journal of the Electrochemical Society, 2006, 153(6):K15-K22.
- [2] ROGERS C, COPPETA J, RACZ L, et al. Analysis of flow between a wafer and pad during CMP processes [J]. Journal of Electronic Materials, 1998, 27(10):1082-1087.
- [3] TIAN Y B, LAI S T, ZHONG Z W. Slurry flow visualisation of chemical mechanical polishing based on a computational fluid dynamics model[J]. Advanced Materials Research, 2012, 565:324-329.
- [4] SHI F G, ZHAO B. Modeling of chemical-mechanical polishing with soft pads[J]. Applied Physics A, 1998, 67(2):249-252.
- [5] BASIM G B, ADLER J J, MAHAJAN U, et al. Effect of particle size of chemical mechanical polishing slurries for enhanced polishing

with minimal defects [J]. Journal of the Electrochemical Society, 2000, 147(9):3523-3528.

- [6] REMSEN E E, ANJUR S, BOLDRIDGE D, et al. Analysis of large particle count in fumed silica slurries and its correlation with scratch defects generated by CMP[J]. Journal of the Electrochemical Society, 2006, 153(5):G453-G461.
- [7] LEVERT J A, KORACH C S. CMP friction as a function of slurry silica nanoparticle concentration and diameter [J]. Tribology Transactions, 2009, 52(2):256-261.
- [8] TERRELL E J, HIGGS III C F. A modeling approach for predicting the abrasive particle motion during chemical mechanical polishing [J]. Journal of Tribology, 2007, 129(4):933-941.
- [9] NGUYEN N Y, TIAN Y, ZHONG Z W. Modeling and simulation for the distribution of sluryparticles in chemical mechanical polishing
 [J]. International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2014, 75(1/2/3/4):97-106.
- [10] STEIN D J, CECCHI J L, HETHERINGTON D L. Atomic force microscopy, lateral force microscopy, and transmission electron microscopy investigations and adhesion force measurements for elucidation of tungsten removal mechanisms[J]. Journal of Materials Research, 1999, 14(9):3695-3706.
- [11] MAHAJAN U, BIELMANN M, SINGH R K. Abrasive effects in oxide chemical mechanical polishing[J]. Mater Res Soc Symp Proc, 2000, 566:27-32.
- [12]ZHAO J S. Fracture mechanics and fracture physics [M]. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology Press, 2003.
- [13] CAO H S, CHEN D R. Nano particles' behavior in non-Newtonian slurry in mechanical process of CMP[J]. Tribology Letters, 2006, 24(3):179-186.
- [14] IGLESIAS G R, FERNANDEZ RUIZMORON L, DURAN J D G, et al. Dynamic and wear study of an extremely bidisperse magnetorheological fluid[J]. Smart Materials & Structures, 2015, 24(12): 127001.

(编辑 杨 波)