

화학-기계적 연마 공정의 물질제거 메커니즘 해석 Part II: 동적 시뮬레이션

석종원[†] · 오승희^{*}

[†]중앙대학교 기계공학부, ^{*}중앙대학교 기계공학부 대학원

An Analysis on the Material Removal Mechanism of Chemical-Mechanical Polishing Process Part II: Dynamic Simulation

Jong Won Seok[†] and Seung Hee Oh^{*}

[†]Sch. of Mech. Eng. at Chung-Ang Univ., ^{*}Grad. Sch. of Mech. Eng. at Chung-Ang Univ.

ABSTRACT

The integrated thermal-chemical-mechanical (TCM) material removal model presented in the companion paper is dynamically simulated in this work. The model is applied to a Cu CMP process for the simulation and the results of the three individual ingredients composing the model are presented separately first. These results are then incorporated to calculate the total material removal rate (MRR) of the Cu CMP. It is shown that the non-linear trend of MRR with respect to the applied mechanical power (i.e., non-Prestonian behavior), which is not well explained with the models established in principle on conventional contact mechanics, may be due to the chemical reaction(s) varying non-linearly with the temperature in the wafer.

Key Words : Chemical-Mechanical Polishing, Thermal-Chemical-Mechanical Modeling, Dynamic Simulation, Non-Prestonian Behavior

1. 서 론

화학-기계적 연마공정(Chemical Mechanical Polishing; CMP)은 슬러리(Slurry)를 구성하는 화학제에 의한 화학작용과 연마입자에 의한 기계적 연마작용에 의해 반도체 공정 시 웨이퍼의 지역적, 광역적 평탄화를 얻는 공정이다. CMP장비를 이용한 연마공정 중 웨이퍼는 하부에 부착된 돌기(Asperities)를 가지는 유연한 패드에 일정한 압력을 가하며 회전하게 되며, 이때 연마입자(Abrasives)를 포함하는 슬러리가 웨이퍼와 패드의 압착면 사이에 공급된다[1]. 이때 웨이퍼에 인가하는 압력은 주요 공정변수 중 하나로 이는 연마하고자 하는 대상물의 성질과 용도에 따라 결정되는 물리량이다.

Cu CMP인 경우 일반적으로 약 30~40 kPa에서 공정이 수행되나 효율이나 수율 향상의 목적을 위하여 약 70~80 kPa의 압력조건에서 공정이 수행되기도 한다 [2]. 화학-기계적 연마 공정의 물질제거율은 연마 속도, 압력, 패드의 점탄성 거동, 슬러리의 화학조성으로 발생하는 유기 박막, 온도 등의 다양한 변수에 의존적이므로 이를 모두 고려한 모델링은 제안하기 어렵다[3]. 이전의 많은 연구들에서 물질제거 메커니즘을 밝히기 위한 많은 모델링 연구가 수행되었으나 대부분 화학적 효과와 기계적 효과가 연성되어 나타나는 실제 물질제거 메커니즘과 달리 화학 반응에 의한 물질제거와 연마입자에 의한 기계적 물질제거를 분리시켜 모델링되어 왔다.

실제 CMP공정에서 슬러리가 포함하는 연마입자에 의한 연마과정은 실제 웨이퍼의 물질제거를 야기할 뿐 아니라 마찰열을 발생시켜 화학반응을 촉진시킨다.

[†]E-mail : seokj@cau.ac.kr

그러므로 이를 고려하지 않은 이전의 모델들은 실제 CMP과정을 모델링 하는데 부족하다. CMP공정의 모델링에서 물질제거율의 예측에 사용되는 접근방법 중 하나인 Preston 방정식[4]은 웨이퍼에 가해주는 압력 혹은 웨이퍼와 패드의 상대속도에 비례하는 물질제거율을 보인다.

많은 실험 결과들에 따르면 압력 혹은 속도의 증가는 선형적인 물질제거율의 증가를 일으키지만[5], 특정 영역에서는 비선형적으로 증가하는 물질제거율이 나타난다[6]. 이는 주로 비교적 높은 인가압력, 즉 약 40 kPa이상의 조건인 경우 두드러지게 나타나는데[2] 이러한 영역에서는 화학적 효과가 큰 영향을 미치는 것으로 알려져 있다. 따라서 이러한 비프레스토니안 거동을 설명하기 위해서는 기계적 작용과 화학적 작용의 연성 효과를 함께 고려한 모델이 요구된다.

본 연구에서는 실제 CMP공정에서의 조건을 적용시켜 이를 시뮬레이션 하여 모델링 연구에서[1] 제시한 모델의 타당성을 입증하고자 하였다. 이 모델은 기존의 모델과 달리 웨이퍼-패드-입자 사이의 탄소성 접촉에 의한 기계적 효과와, 마찰열에 의한 열시스템을 고려하여 온도변화에 의존하는 화학적 효과를 포함한 통합

모델로 이를 Table 1에 나타난 실제 운전조건에 따라 시뮬레이션 하였으며, 이때 수치해석을 위해 Matlab™과 Simulink[7]를 사용하였다.

2. 모델 시뮬레이션

2.1. 기계적 효과에 의한 물질제거율

Fig. 1은 접촉이론을 이용하여 웨이퍼-입자-패드에 작용하는 힘과 접촉면을 계산하기 위한 Simulink[7] 프로그램의 보여준다. Table 1에 나타난 CMP공정에 사용되는 입자들의 값들을 이용하여 접촉면과 웨이퍼로의 새김깊이를 계산하였으며, 이를 통해 물질제거율을 계산하였다(Ref. [1]의 식 (9)). 또한 여기서 구한 웨이퍼와 패드의 분리거리, 즉 슬러리의 기하학적 두께는 화학적 모델에서 슬러리의 농도변화를 계산하기 위해 되먹임 된다.

2.2. 웨이퍼-슬러리-패드의 열전달 모델

CMP공정에서 접촉에 의한 마찰열의 발생으로 인한 온도는 물질제거율에 영향을 준다[8]. 웨이퍼와 연마 입자와 패드의 접촉은 이들의 접촉면에서 마찰에 의한

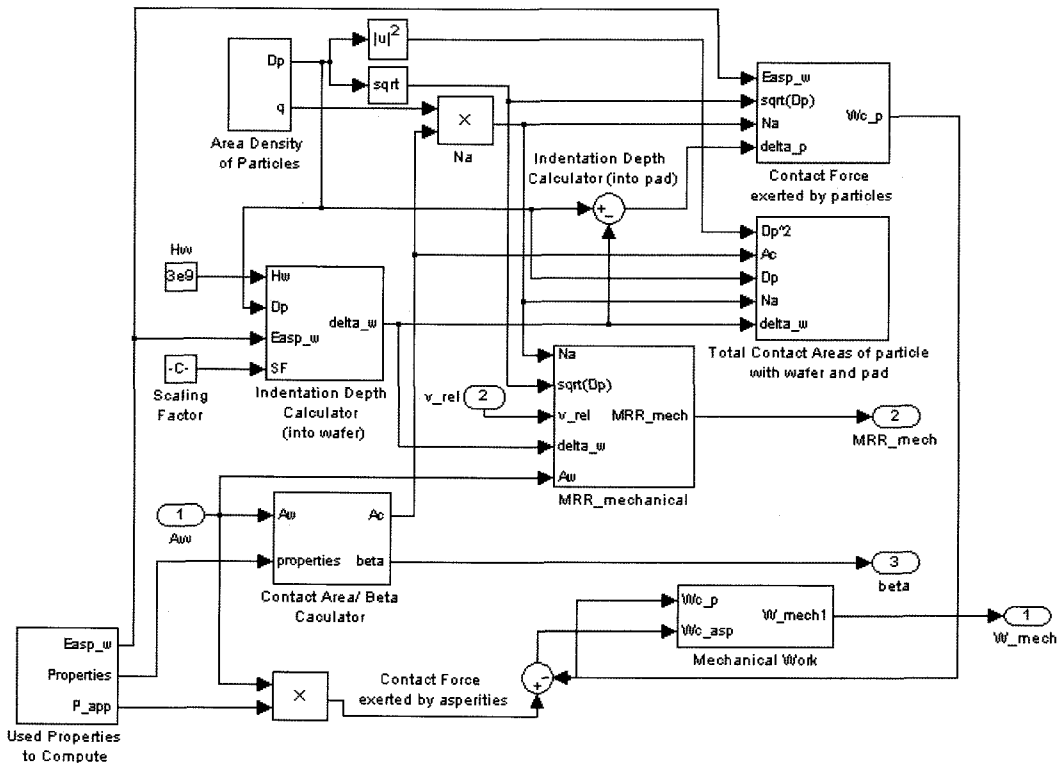


Fig. 1. Simulink program for the calculation of MRR due to mechanical abrasion based on contact.

Table 1. Parameter values used in the computer simulation [9-11]

Symbol	Value	Unit	Symbol	Value	Unit
$b_f \cdot \dot{\rho}_f$	0.134	kg/m ² s	R_{asp}	10	μm
b_p	1.27	mm	T_{f0}	23.5	°C
b_w	0.73	mm	T_{∞}	23.5	°C
C_0	0.1	mol	v_{rel}	0.62	m/s
$c_{p,f}$	4009.5	J/kg°C	η	200	1/mm ²
$c_{p,p}$	1130	J/kg°C	μ	10	μm
$c_{p,w}$	712	J/kg°C	$\mu_{w,asp}$	0.18	.
D_p	10	nm	$\mu_{w,p}$	0.5	.
$E_{asp,w}$	109.0	MPa	ρ_p	1100	kg/m ³
h_a	7.5	W/m ² °C	ρ_w	2330	kg/m ³
h_f	2025	W/m ² °C	σ	6	μm
H_w	3	GPa	χ	0.05	.
P_{app}	30	kPa	ω	6.283	rad/s
r_0	4	in			

열에너지가 발생되고 이는 웨이퍼-슬러리-패드가 구성하는 열시스템의 주요 열원으로 작용한다[9]. 웨이퍼와 패드, 슬러리의 각 구성 요소의 열전달 과정은 Ref. [1]의 식 (13), (14), (16)에 나타난 연성된 1차 미분방정식들로 표현하였다.

Fig. 2는 이를 고려한 열시스템의 모델에 대한 Simulink[7] 프로그램을 나타낸다. 이 모델에서는 Table 1에 나타난 CMP공정에 사용되는 인자들의 물성치를 이용하여 슬러리와 웨이퍼 및 패드의 열전달을 나타내는 상기 연성된 1차 미분방정식들을 수치적으로 계산하였다. 그림의 좌측하단에서와 같이 Fig. 1에 도시한 접촉해석을 통하여 구해진 기계적 마찰일을 W_{mech} 은 이 열 시스템의 열원으로 취급된다. 이때 계산을 통하여 구해진 웨이퍼의 온도는 웨이퍼의 표면에서 일어나는 반응속도 상수를 계산하기 위해 화학적 모델에 입력된다.

2.3. 집중계수방법을 이용한 화학반응 모델

웨이퍼와의 마찰에 의해 발생하는 마찰열로 인한 열 시스템으로부터 구해진 온도 변화는 화학 반응에 영향

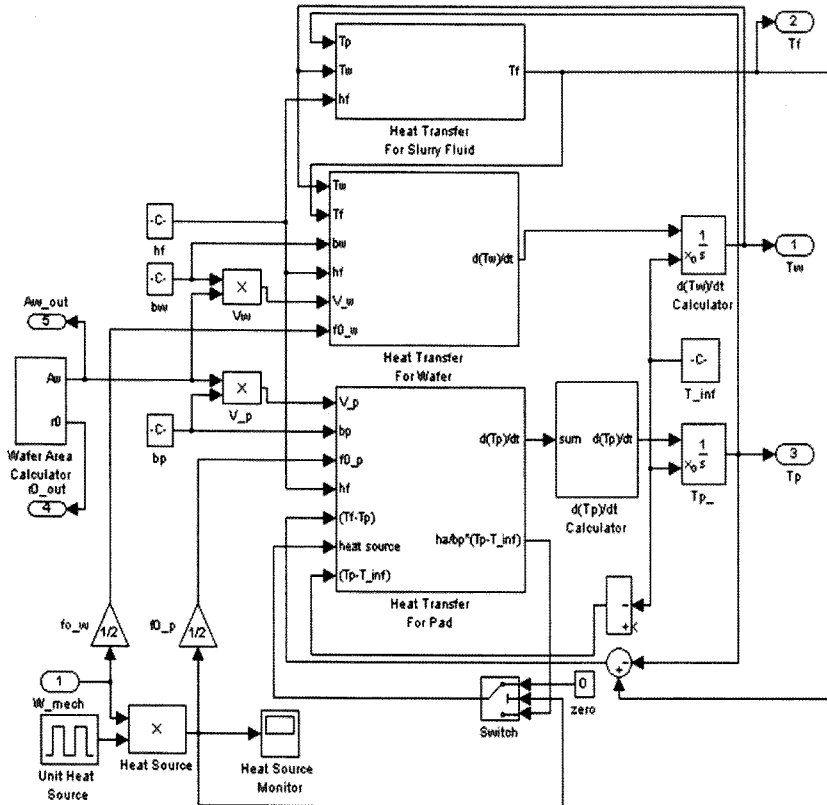


Fig. 2. Simulink program for the calculation of MRR due to chemical reaction.

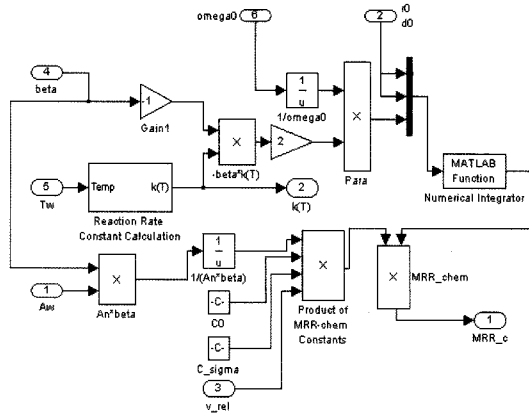
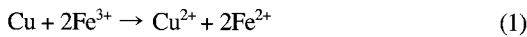


Fig. 3. Simulink program for the calculation of chemical reaction rate constant.

을 주어 물질제거율에 영향을 미친다. 본 연구에서는 구리막을 질산철구수화물 (Ferric Nitrate)이 포함된 슬러리를 사용하여 수행하는 CMP공정을 시뮬레이션 하였다. 이때 화학반응식은 다음 식과 같이 나타낼 수 있다.



연속교반 액상 반응기(Continuous Stirred Tank Reactor; CSTR)로 가정된 모델에서의 반응물의 농도변화와 반응속도 및 반응속도 상수는 각각 Ref. [1]의 식(18)-(20)에 나타내었다. 웨이퍼 표면의 온도의 변화는 슬러리의 화학제에 의한 반응의 속도상수를 아레니우스 식 [1, 12]에 따라 변화시켜 화학적 효과에 의한 물질제거율에 영향을 준다. 이때 화학반응에 의한 MRR은 Ref. [1]의 식(21)을 이용하여 구하였다. 이때, 식 (1)의 반응속도 상수는 실험을 통하여 구한 질 산철구수화물(Ferric Nitrate)의 농도변화율[11]을 이용하여 구하였다.

Fig. 1에 나타낸 접촉해석을 통해 구한 기계적인 마찰일률은 Fig. 2에 도시한 열시스템에서 열원으로 작용하며, 이때 구한 웨이퍼의 온도는 웨이퍼의 표면반응에 영향을 주고 최종적으로 화학적 물질제거율을 변화시킨다.

2.4. 연성 통합 (TCM) 모델

Fig. 1-3에서 도시한 바와 같이 각 열, 접촉 및 화학적(Thermal-Chemical-Mechanical) 구성요소들은 서로 연성되어 하나의 통합된 모델(TCM Model)을 구성하며 이러한 통합모델을 이용하면 최종적인 물질제거율을 계산할 수 있다. 이때 총 물질제거율은 Ref. [1]의 식(9)와 (21)의 합으로 계산할 수 있으며, 본 통합모델로 예측한 Cu CMP공정의 최종물질제거율을 구하기

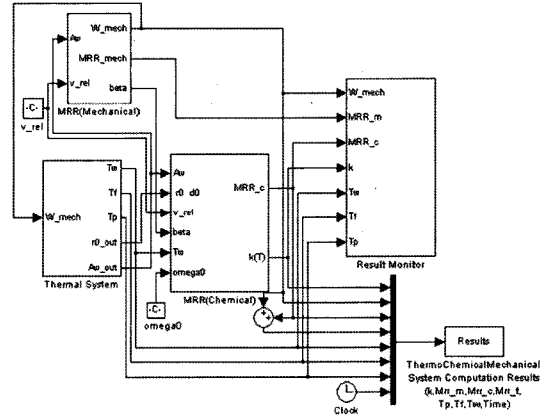


Fig. 4. Simulink program depicting the proposed TCM model.

위한 Simulink[7] 프로그램을 Fig. 4에 나타내었다.

3. 결과 및 토론

많은 CMP공정의 실험결과에 따르면 저압의 영역에서는 압력과 속도의 변화에 대하여 프레스톤 방정식과 같이 선형적 증가를 예측할 수 있지만, 고압의 영역에서는 잘 맞지 않는다. 이는 기존의 연마과정을 설명하는 접촉모델들에서 고려하지 못한 고압의 영역에서 발생하는 마찰에 의한 열의 작용이 주로 작용한 결과로 판단된다. 이러한 마찰열은 CMP의 각 공정요소들(웨이퍼, 패드 및 슬러리의 온도변화를 야기하고 이때 온도는 계에 가해진 일률과 계 외부로 열전달 되어 발산되는 열량이 균형을 맞출 때 일정 온도로 포화된다.

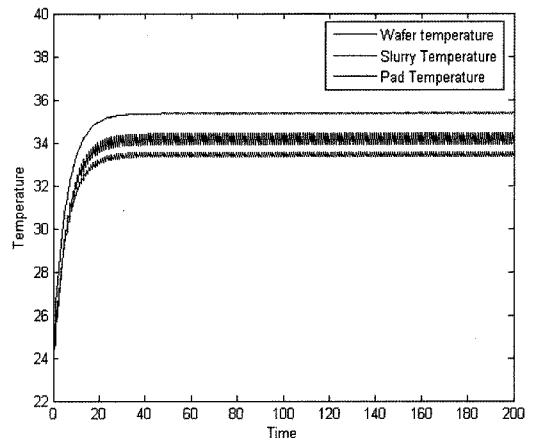


Fig. 5. Time variations of temperatures of wafer, slurry and pad.

Fig. 5는 이러한 각 공정요소들의 시간에 따른 온도변화를 보여주고 있다. 한편, 식(1)에 나타난 화학반응에 의한 발생 열량은 본 시뮬레이션에서는 무시하였다. 본 시뮬레이션에서는 기계적인 마찰일률이 열량으로 전환되어 웨이퍼와 패드에 균등히 배분된다고 가정하였다.

따라서 Fig. 5에서 나타나는 바와 같이 슬러리는 웨이퍼와 패드에 공급된 열량을 거의 외부로 이송시키는

역할을 한다. 또한 패드의 1회전당 소요되는 시간에 대한 패드와 웨이퍼가 접촉하고 있는 시간의 분율에 따라 온도의 상승과 저하가 반복되는 주기는 변동하게 되며 이때 온도의 변동폭을 Fig. 5에서는 잘 보여주고 있다. 한편 슬러리 온도는 패드온도의 함수로 표현되기 때문에 다소의 온도변화가 나타나는데 이의 평균값을 슬러리의 평균온도로 간주할 수 있다.

CMP공정 중 고압 혹은 고속의 회전에 의하여 웨이퍼에 가해지는 마찰력은 증가하고 이는 전체적인 온도를 증가시킨다. 그러므로 이를 고려하지 않은 계산결과(Fig. 1 참조)는 Fig. 6(a)와 같이 압력의 증가에 따라 선형적으로 증가하는 경향을 보인다. 한편, 실제 화학적인 효과로 인해 웨이퍼의 표면을 연화되어 물질제거율의 경향에 영향을 준다고 알려져 있으나 본 모델에서는 이를 고려하지 않았다. 표면의 연화는 화학적인 활성도의 함수로 기계적인 물질제거 메커니즘에도 영향을 미쳐 다소간의 비선형적인 경향을 보여주리라고 예측할 수 있으나 본 연구에서는 화학반응에 의한 변화량에 비해서는 그 영향이 충분히 작다고 가정하였다.

반면, 마찰의 증가로 열시스템에 공급하는 기계적 마찰에너지의 증가로 상승한 웨이퍼의 온도에 따른 화학반응은 Fig. 6(b)와 같이 비 선형적인 증가를 보인다. 본 연구에서는 화학적 혹은 기계적인 효과만을 편중하여 고려된 모델로 설명할 수 없는 비프레스토니안 거동을 설명하기 위하여 상기 모델들을 모두 고려한 통합된 TCM모델을 제안하고 이를 통하여 각 모델이 가지고 있는 한계를 극복하고자 하였다. 본 통합모델의 계산결과에 따르면 Fig. 6(c)와 같이 비교적 저압의 영역에서는 선형적으로 증가하지만 고압의 영역에서는

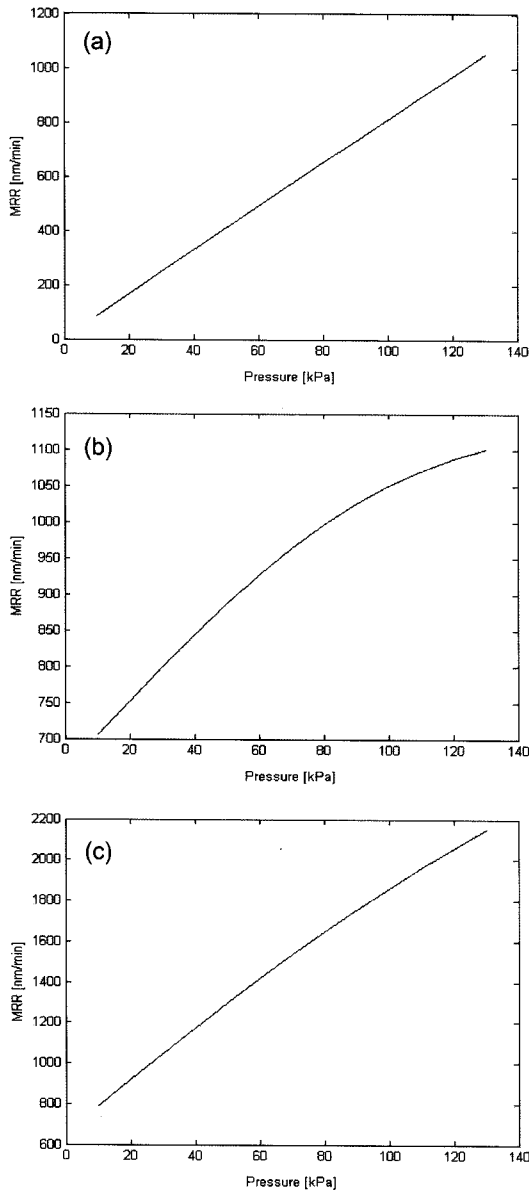


Fig. 6. MRR variations due to (a) mechanical effect, (b) chemical effect, (c) both mechanical and chemical effects.

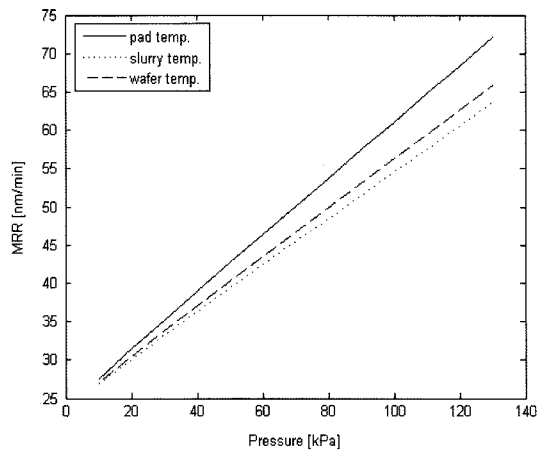


Fig. 7. Temperature Variations of pad, wafer and slurry film.

비선형적으로 증가하는 물질제거율을 보여줌을 알 수 있다.

한편, 웨이퍼에 가해지는 압력이 증가함에 따라 마찰에너지는 증가하므로 이때 CMP공정에서 각 요소들(웨이퍼, 패드 및 슬러리)의 온도는 상승하게 된다. 실험결과에 의하면 압력의 증가는 온도의 선형적 증가를 야기하는데[13] Fig. 7은 이러한 경향을 잘 설명해 주고 있다. 이 그림에서 알 수 있듯이 압력의 선형적인 증가는 마찰에너지의 선형적인 증가를 야기하므로 각 요소들의 온도 역시 선형적으로 상승한다. 반면, 선형적으로 증가하는 온도에 의하여 반응속도상수는 비선형적으로 증가하는 경향을 보이기 때문에 화학적 물질 제거율은 비선형적인 증가를 보이고, 이는 총 물질제거율이 웨이퍼에 가해지는 일률에 비선형적으로 변화하는 경향을 잘 설명해 준다고 판단된다.

4. 결 론

화학-기계적 효과가 연성되어 나타나는 CMP공정의 모델링을 위하여 이전의 연구에서 접촉 모델과 마찰에 의한 열시스템과 온도 변화에 따른 화학적 효과를 모두 고려한 통합 TCM모델을 제시하였다. 본 연구에서는 이 모델에 실제 공정 시 사용되는 물성치를 도입하여 시뮬레이션을 함으로써 화학적 효과와 기계적 효과가 연성되어 나타나는 물질제거율을 보였다. 이는 기존의 모델들이 설명하지 못한 비프레스토니안 거동을 설명함으로써 기존의 모델의 한계를 극복한 새로운 모델의 타당성을 확보하였다. 한편, CMP공정에서 물성치 등 사용인자들에 대한 정확한 수치는 알기 어려우므로 계산을 통하여 정확한 결과를 예측하는 데에는 다소 어려움이 있다. 이는 추후 더 연구되어야 할 부분이라고 생각된다.

감사의 글

이 논문은 2005년도 중앙대학교 학술연구비 지원에 의한 것임.

참고문헌

1. 석종원, 오승희, 석종혁, "화학-기계적 연마공정의 물질제거 메커니즘 해석, Part I: 연성 통합 모델링", 반도체 및 디스플레이장비학회지, Vol. 6, No. 2, pp. 35-40, 2007.
2. Guo, L. and Shankar Subramanian, R. "Mechanical removal in CMP of copper using alumina abrasives", Journal of The Electrochemical Society, Vol. 151, No. 2, pp. G104-G108, 2004.
3. 김구연, 김형재, 박범영, 이현섭, 박기현, 정해도, "CMP연마입자의 마찰력과 연마율에 관한 영향", 전기전자재료학회논문지, 17, 10, pp. 1049-1055, 2004.
4. Preston, F. W. "The theory and design of plate glass polishing machines", Journal of the Society of Glass Technology, 11, pp. 214-256, 1927.
5. Forsberg, M. "Effects of process parameters on material removal rate in chemical mechanical polishing of Si(1 0 0)", Microelectronic Engineering, 77, pp. 319-326, 2005.
6. Wrschka, P., Hernandez, J., Hsu, Y., Kua, T. S., Oehrlein, G. S., Sun, H. J., Hansen, D. A., King, J., and Fury, M. A. "Polishing parameter dependencies and surface oxidation of chemical mechanical polishing of Al thin films", Journal of Electrochemical Society, 146, 7, pp. 2689-2696, 1999.
7. Mathworks, Matlab™ version 6.5, 2002, Mathworks Inc.
8. Kwon, D., Kim, H., and Jeong, H. "Heat and its effects to chemical mechanical polishing", Journal of Materials Processing Technology, 178, pp. 82-87, 2006.
9. White, D., Melvin, J., and Boning, D. "Characterization and modeling of dynamic thermal behavior in CMP", Journal of the Electrochemical Society, 150, 4, pp. G271- G278, 2003.
10. 석종원, "화학기계적 연마 프로세스의 동적 열전달 모델링 연구", 대한기계학회논문집 A, 28, 5, pp. 617-623, 2004.
11. Subramanian, R. S., Zhang, L., and Babu, S. V. "Transport phenomena in chemical mechanical polishing", Journal of the Electrochemical Society, 146, 11, pp. 4263-4272, 1999.
12. Sorooshian, J., DeNardis, D., Charns, L., Li, Z., Shadman, F., Boning, D., Hetherington, D., and Philipossian, A. "Arrhenius characterization of ILD and copper CMP processes", Journal of the Electrochemical Society, 151, 2, pp. G85-G88, 2004.
13. Shih, S. Y., and Chen, L. J. "Thermal characteristics study of CMP low dielectric constant material", CMP-MIC Conference, 19-20, pp. 305-312, 1998.