

CMP 润滑方程的多重网格法求解*

张朝辉 锥建斌 温诗铸

清华大学摩擦学国家重点实验室, 北京 100084

摘要 化学机械抛光(chemical mechanical polishing, CMP)是用于获取全局和局部高级别平面度的技术, 其作用机理包含流体动力作用. 求解 CMP 的润滑方程有助于对其作用机理的了解和认识. 文中利用线松弛技术和多重网格技术进行求解, 并考察了不同输入参数下的载荷与转矩等的变化情况.

关键词 化学机械抛光 多重网格法 线松弛 全网格近似

微电子产业的规模和技术水平已成为衡量一个国家地位和综合国力的重要指标之一. 在现代集成电路(integrated circuit, IC)技术中, 一个重要的挑战是获得介电常数小于 3, 高纵横比的间隙充填并且具有全局平面度的绝缘体, 以用于通常的多层金属体^[1]. 集成电路越来越复杂且尺寸越来越小, 这对制造过程提出了更高的要求. 电路设计和制造要求晶片有高的平面度. 化学机械抛光(chemical mechanical polishing, CMP)是用于获取全局和局部高级别平面度的技术, 得到了越来越多的应用^[2].

CMP 涉及复杂的摩擦行为, 包括化学反应和机械作用. 在 CMP 中, 主要的相互作用在于膜的形成与切除、抛光屑从表面带出、抛光液中添加剂在粒子表面、晶片表面和相应不同两层之间的吸附和电荷, 等等, 抛光液、抛光垫和晶片的相互作用同时发生. 对此目前尚缺乏系统的摩擦学设计.

抛光中的一个重要问题是使抛光液在抛光垫和晶片之间的均匀分布. 人们基于流体动力理论进行了多方面的研究. 如 Runnels 等^[3]在数值求解 Navier-Stokes 方程后研究了 CMP 的润滑特性与其磨损率. Sundararajan 等^[4]通过求解 Reynolds 方程得出了抛光液膜厚和流体动压力. Park 等^[5]通过建立化学机械抛光硅片时的流体力学模型, 分析了抛光液的厚度和压力分布及接触应力.

对 CMP 所进行的研究也越来越深入到机理层次. 通过对其润滑方程的求解将有助于这一过程研

究的深化. 本文将介绍 CMP 润滑方程的求解方法, 并给出系统的数值模拟结果.

1 CMP 基本方程

图 1 是典型的抛光机原理图, 其润滑问题的基本方程包括:

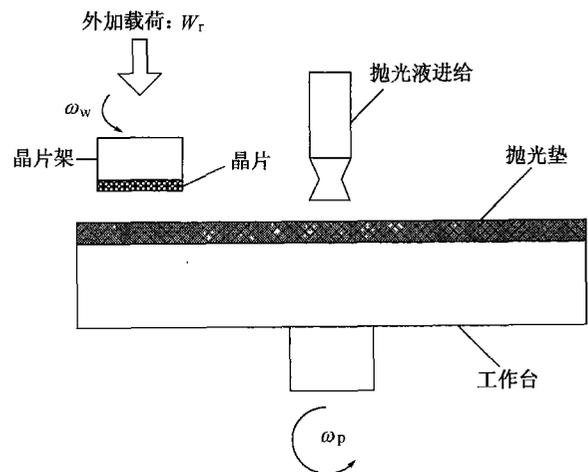


图 1 化学机械抛光原理

无量纲润滑方程

$$\bar{r}^2 \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{h}^3 \frac{\partial \bar{p}}{\partial \bar{r}} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\bar{h}^3 \frac{\partial \bar{p}}{\partial \theta} \right) = \chi \Lambda \bar{r}^2 (\bar{r} + \xi \bar{r} + D \cos \theta) * (\sin \alpha \sin \theta - \sin \beta \cos \theta) - \Lambda \bar{r} D \sin \theta, \quad (1)$$

2003-03-14 收稿, 2003-06-02 收修改稿

* 国家自然科学基金(批准号: 59735110)和国家杰出青年科学基金(批准号: 50025515)资助项目

E-mail: zhangch@post.pim.tsinghua.edu.cn

无量纲膜厚方程

$$\bar{h} = 1 - \chi \bar{r} \sin \alpha \cos \theta - \chi \bar{r} \sin \beta \sin \theta, \quad (2)$$

无量纲载荷和无量纲力矩式

$$\bar{W}_f = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^1 \bar{p} r dr d\theta, \quad (3)$$

$$\bar{M}_x = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^1 \bar{p} r^2 \sin \theta dr d\theta, \quad (4)$$

$$\bar{M}_y = -\frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^1 \bar{p} r^2 \cos \theta dr d\theta. \quad (5)$$

各无量纲量定义为

$$\chi = \frac{r_0}{h_{piv}}, \Delta = \chi^2 \frac{6\eta\omega_p}{p_0}, \bar{r} = \frac{r}{r_0},$$

$$\bar{h} = \frac{h}{h_{piv}}, \bar{p} = \frac{p}{p_0}, D = \frac{d}{r_0}, \xi = \frac{\omega_w}{\omega_p}$$

以上各式中, r_0 为晶片半径, h_{piv} 为晶片中心高度, η 为抛光液粘度, ω_p 和 ω_w 分别为抛光垫和晶片的旋角转速, p_0 为参考压强(通常为环境压强), d 为晶片和抛光垫的旋转中心距, α 和 β 分别为转角(roll angle)和倾角(pitch angle), 各参量上的一横表示无量纲量。

2 计算技术

2.1 润滑方程的离散

对润滑方程(1)采用具有二阶精度的五点中心差分格式, 可得到其离散形式为:

$$\begin{aligned} & \frac{\bar{r}_i^2}{h_r^2} (\epsilon_{i-1/2, j} \bar{p}_{i-1, j} + (\epsilon_{i-1/2, j} + \epsilon_{i+1/2, j}) \bar{p}_{i, j} + \\ & \epsilon_{i+1/2, j} \bar{p}_{i+1, j}) + \frac{1}{h_\theta^2} (\epsilon_{i, j-1/2} \bar{p}_{i, j-1} + (\epsilon_{i, j-1/2} + \\ & \epsilon_{i, j+1/2}) \bar{p}_{i, j} + \epsilon_{i, j+1/2} \bar{p}_{i, j+1}) = f_{i, j}, \quad (6) \\ & \epsilon = \bar{h}^3, \\ & \epsilon_{i\pm 1/2, j} = \frac{1}{2} (\epsilon_{i, j} + \epsilon_{i\pm 1, j}), \\ & \epsilon_{i, j\pm 1/2} = \frac{1}{2} (\epsilon_{i, j} + \epsilon_{i, j\pm 1}), \\ & f_{i, j} = \chi \Delta \bar{r}_i^2 (\bar{r}_i + \xi \bar{r}_i + D \cos \theta_j)^* \\ & (\sin \alpha \sin \theta_j - \sin \beta \cos \theta_j) - \Delta \bar{r}_i D \sin \theta_j. \end{aligned}$$

2.2 网格分布形状

如图2所示, 在径向和周向均采用等距网格, 在周向上起点($j=0$)和终点($j=jj$)重合, 中心的压力则由阴影区流量式求出^[5]。

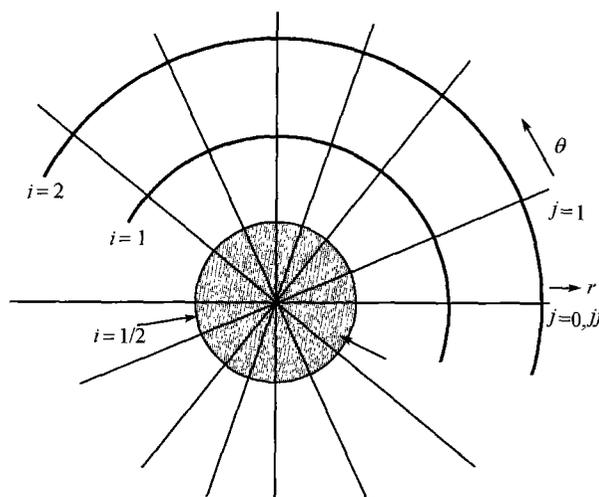


图2 节点网格分布

2.3 线松弛

对离散方程(6)的求解是问题的关键. 由于方程第一项中的系数 r_i 在 0 到 1 之间变化, 在其求解域内可表现出在径向或周向的弱耦合. 采用线松弛技术(line relaxation)和多重网格技术结合求解将是一个有效的手段^[6]。

径向的线松弛技术可描述如下. 对 j 列的各个变量可列出方程:

$$A^j \bar{p}_j = f_j, \quad (7)$$

其中 $\bar{p}_j = (\bar{p}_{1, j}, \dots, \bar{p}_{ii-1, j})^T$ 为 j 列上的未知量向量, ii 为径向的总节点分段数. $f_j = (f_{i, j}, \dots, f_{ii-1, j})^T$ 为相应的右端向量. $A^j = (a_{k, l})$ 则为主对角占优的三对角矩阵. 其中各行非零项为

$$\begin{aligned} a_{k, k-1} &= \frac{r_i^2}{h_r^2} \epsilon_{k-1/2, j}, \\ a_{k, k} &= -\frac{r_i^2}{h_r^2} (\epsilon_{k-1/2, j} + \epsilon_{k+1/2, j}), \\ a_{k, k+1} &= \frac{r_i^2}{h_r^2} \epsilon_{k+1/2, j}. \end{aligned}$$

方程(7)可以用追赶法^[7]快速求得精确解. 由于 r_i 是变化的, 一个可行解决办法是将径向的线松弛

迭代和周向的线松弛迭代交错进行。

2.4 多重网格法

多重网格法是一种而有效求解方法，在润滑问题的求解中也得到了广泛的应用^[6,8]，而且尚在发展，如提出了最小残差光滑^[9]和 FULL-FAS 算法^[10]等。

对离散方程

$$Lp = f \tag{8}$$

(L 为微分算子， p 为未知向量， f 为右手函数向量)的多重网格法，简单地说，就是在粗网格上求解残差方程

$$L_c v = I_f^c(f - L_f p), \tag{9}$$

式中 L_c 为粗网格上微分算子， I_f^c 为精网格到粗网格上的限制算子， L_f 为精网格上的右手函数向量。在求得修正量后再插值到精网格上进行修正。

3 数值计算结果

在计算中未指明的参量采用典型数值为： $\omega_w = 50 \text{ r/min}$ ， $\omega_p = 100 \text{ r/min}$ ， $h_{piv} = 50 \mu\text{m}$ ， $\alpha = 0.02^\circ$ ， $\beta = 0.018^\circ$ ， $\eta = 0.00214 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ ， $d = 150 \text{ mm}$ ， $r_0 = 50 \text{ mm}$ ， $p_0 = 101 \text{ kPa}$ 。

图3是模拟的无量纲载荷、无量纲转矩与节距高度的变化情况。从图3可以看出，随着晶片与抛光垫之间的间隙增大，载荷与转矩(绝对值)均减小。这表明要维持合适的抛光性能，应当选取适当的间隙值(间隙过大则无承载能力从而降低抛光性能，间隙过小则有可能小于抛光粒子尺寸，从而不利于抛光)。

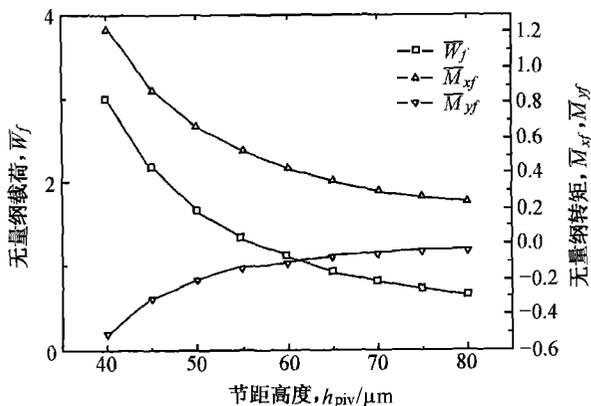


图3 无量纲载荷、转矩与节距高度的关系

图4, 5是模拟的无量纲载荷、无量纲转矩与旋转角度及倾角等的变化情况。从图4可以看出，旋转角为零时有最小的承载能力。对 y 轴的转矩关于旋转角度的变化对称分布。而图5则可以看出来倾角增加导致的载荷与变化是增加的。这表明在化学机械抛光中的姿态角的选择是相当重要的。

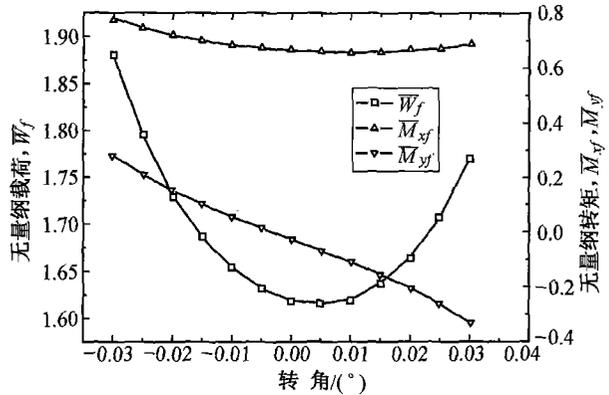


图4 无量纲载荷、转矩与旋转角

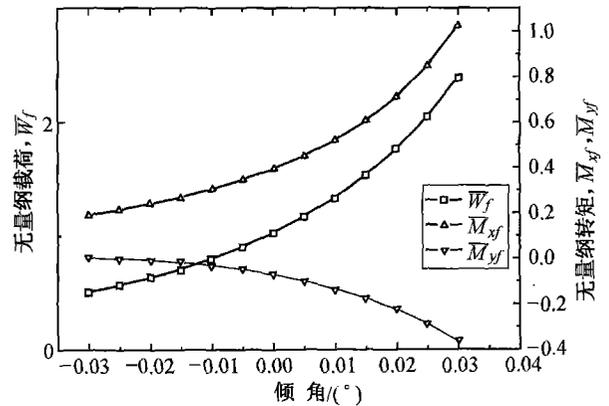


图5 无量纲载荷、转矩与倾角

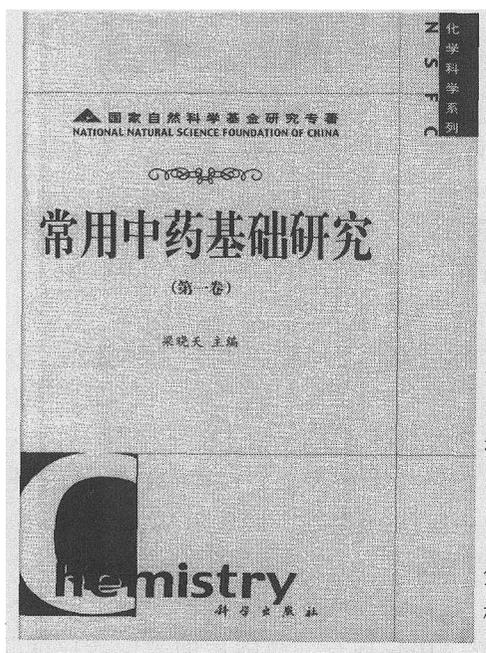
4 结论

CMP 在获取高级别的整体度和局部均匀度中极其重要，现在进行的研究也越来越深入到揭示机理的层次。抛光液的行为包含流体动力作用，因此了解其润滑特性将有重要意义。

本文提出了描述 CMP 润滑行为的 Reynolds 方程的数值求解方法，即利用线松弛技术和多重网格法耦合进行求解，能够获得快速和稳定收敛解。给出了数值模拟的无量纲载荷、力矩与间隙、旋转角度和倾角等的变化关系。可提供 CMP 过程的有用信息。

参 考 文 献

- Hartmannsgruber E, et al. A selective CMP process for stacked low-k CVD oxide films. *Microelectronic Engineering*, 2000, 50: 53
- Lei H, et al. Chemical mechanical polishing of computer hard disk substrate in colloidal SiO₂ slurry. *International Journal of Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 2002, 3(3-4): 455
- Runnels S R, et al. Tribology analysis of chemical-mechanical polishing. *Journal of the Electrochemical Society*, 1994, 141(6): 1698
- Sundararajan S, et al. Two-dimensional wafer-scale chemical-mechanical planarization models based on lubrication theory and mass transport. *Journal of the Electrochemical Society*, 1999, 146(2): 761
- Park S S, et al. Hydrodynamic analysis of chemical mechanical polishing process. *Trib Intern*, 2000, 33: 723
- Venner C H, et al. *Multilevel Methods in Lubrication*. New York: Elsevier, 2000
- 李庆扬, 等. 数值分析(第三版). 武汉: 华中理工大学出版社, 1982
- 杨冲然. 流体润滑数值分析. 北京: 国防工业出版社, 1998
- Zhang J. Multi-level minimal residual smoothing: A family of general purpose multigrid acceleration techniques. *J Computational and Applied Mathematics*, 1998, 100: 41
- Spitaleri R M. Full-FAS multigrid grid generation algorithms. *Applied Numerical Mathematics*, 2000, 32: 483



国家自然科学基金研究专著

《常用中药基础研究》染晓天 著

科学出版社 定价: 148.00 元

本书是中国医学科学院药物研究所为首的全国 10 个科研和教学单位的 100 多位专家学者, 在国家自然科学基金委员会化学科学部自 1989 年以来先后 4 次立项的资助下, 对 52 种常用中药的药效物质基础和作用机理的系统化学研究与主要成分药理学研究的成果总结。通过研究, 从中提取分离了 1000 多个天然化学成分, 分析鉴定了 200 多个新化合物结构, 发现了一批对心脑血管和神经系统, 对抗肿瘤、炎症及延缓衰老等有一定生物活性的化合物。

本书共分两卷。第一卷由 25 章内容组成, 是对其中 25 种常用中药化学和药理学基础研究的成果总结。并探索了部分中药化学成分结构与活性的关系, 以及质量控制的分析方法。各章内容由文献概述、化学研究、药理学研究和总结展望四部分构成。

本书内容翔实、结构严谨。主要适用于中药化学和药理学基础研究单位, 以及中药应用开发研究单位的科研人员, 亦可供临床药师和医师参考。