기계화학적 연마공정중 패드내 미세공극에서의 연마입자의 거동

곽하슬로미 · 양우열 · 성인하^{*†}

한남대학교 대학원 기계공학과

^{*}한남대학교 기계공학과

Slurry Particle behavior inside Pad Pore during Chemical Mechanical Polishing

Haslomi Kwark, Woo-Yul Yang and In-Ha Sung^{*†}

Graduate School of Hannam University, Dept. of Mechanical Engineering

^{}Dept. of Mechanical Engineering, Hannam University*

(Received December 1, 2011; Revised December 25, 2011; Accepted December 28, 2011)

Abstract – In this paper, the results of finite element(FE) analysis of chemical mechanical polishing(CMP) process using 2-dimensional elements were discussed. The objective of this study is to find the generation mechanism of microscratches on a wafer surface during the process. Especially, a FE model with a particle inside pad pore was considered to observe how such a contact situation could contribute to microscratch generation. The results of the finite element simulations revealed that during CMP process the pad-particle mixture could be formed and this would be a major factor leading to microscratch generation.

Keywords – chemical mechanical polishing (기계화학적 연마가공), finite element analysis (FEA, 유한요소해석), fluid-structure interaction (유체-구조 상호작용), Post-CMP surface defects (CMP공정후 표면결함)

1. 서 론

반도체 제조에 있어서 핵심공정인 기계화학적 연마가공(chemical-mechanical polishing, CMP)은 폴리머 연마패드와 미세 연마입자를 포함하는 슬러리를 이용하여 기계적 및 화학적 가공을 통하여 패터닝(patterning)된 웨이퍼표면의 평탄화를 얻는 공정이다. 반도체의 고성능화, 고집적화에 대한 요구로 패터선평이 점차 작아지면서 기계화학적 연마공정에 대해 더욱 우수한 가공정밀도, 신뢰성과 표면품질이 요구되고 있어, 지금까지는 크게 문제되지 않았던 공정의 본질적인 한계점과 난제들이 반드시 해결해야 할 중요 이슈로 떠오르고 있다. 그 중 하나가 공정후 표면에 발생하는 소위 ‘killer

defect’ 라고 일컬어지는 허용치를 넘는 폭과 깊이의 긁힘(scratch), 패임(pitting)과 같은 미세 표면결함(surface defects)이다. 따라서, 미세 표면결함의 원인과 발생 메커니즘에 대해 최근들어 실험과 수치해석 및 컴퓨터 시뮬레이션에 기반한 연구들이 많이 수행되고 있는데[1-4], 연마입자와 웨이퍼 표면간 접촉현상의 복잡성과 다양한 공정변수의 복합적인 영향, 해석을 위한 가정 및 단순화 등으로 인하여 미세결함의 발생양상을 설명할 수 있는 일반적이며 정확한 발생 메커니즘은 그 중요성에도 불구하고 아직 명확하게 밝혀져 있지 않다.

이러한 기존의 연구들에서는 CMP공정후에 발생하는 표면결함의 발생 및 증가 원인으로 거대 연마입자 또는 연마입자의 뭉침(agglomeration), 단단한 연마패드(harder or drier pad), 구리(Cu)와 같은 연질웨이퍼의 경우 큰 마찰력 등이 제시되고 있는데, 본 연구에서는

[†]주저자 · 책임저자 : isung@hannam.ac.kr

연마공정중의 입자-표면, 입자-패드간 접촉에 중점을 두고 그 생성 메커니즘을 규명해 보고자 하였다. 이를 위하여 입자, 웨이퍼, 연마패드 및 접촉계면에서의 슬러리 유동을 고려한 미세유동 채널내에서의 유한요소 모델을 구성하고, 입자-웨이퍼-연마패드 접촉을 통하여 CMP공정중에 나타나는 응력 및 변형을 살펴보았다.

실제 CMP공정에서 연마입자와 웨이퍼, 연마패드의 접촉은 슬러리내에서 이동하는 입자의 웨이퍼 또는 패드 표면으로의 충돌 또는 웨이퍼-입자-연마패드의 직접적인 접촉에 의해 발생한다. 본 연구팀은 원자현미경(atomic force microscope)를 이용한 실험 및 유한요소해석을 이용한 연구를 통하여 접촉응력 및 입자형상, 압력, 속도 등 다양한 공정변수에 따른 입자의 충돌에 의한 접촉과 표면결합 발생양상을 고찰하여 왔다[5-7]. 본 논문에서는 공정중에 가능한 여러 직접적인 접촉양상중에서 특히 폴리머 연마패드의 미세공극(micro pore)을 모델링에 포함하여 미세공극내에서의 슬러리 연마입자와 웨이퍼, 패드의 접촉현상 및 미세공극내의 입자 거동이 표면결합 발생에 미치는 영향을 중점적으로 고찰하였다.

2. 실험 조건 및 방법

본 연구의 목적을 위하여 해석대상계로서 CMP공정에 사용되는 시스템을 고려하여 웨이퍼표면, 슬러리 유체, 연마입자, 폴리머 패드로 구성된 시스템으로 2차원 모델을 구성하였고 유한요소해석 소프트웨어 ADINA-FSI (fluid-structure interaction)를 이용하여 해석을 수행하였다[8,9]. Fig. 1에 공작물과 연마입자, 슬러리 유체의 유한요소 구성모델의 예를 제시하였다.

실제 CMP공정에서 웨이퍼-연마입자-패드간 직접적인 3-body 접촉은, 연마패드의 표면에서의 접촉뿐만 아니라 연마패드에 미세공극이 존재하므로 Fig. 1에서 보이듯이 연마입자가 공극에 들어가서 입자의 운동이 일정 정도 구속된 상태로 접촉이 이루어지게 된다. 본 연구에서는 이러한 미세공극내에서의 입자거동 및 접촉계면에서의 현상을 파악해 보고자 하였다.

연마입자는 실제 CMP공정에서 사용되는 입자의 재질과 크기범위를 감안하여 직경 100 nm의 크기의 silica(SiO_2)로 설정하였다. 입자가 충돌하는 공작물 표면의 재질은 반도체 공정에 많이 사용되는 연질재료인 copper(Cu)와 상대적으로 경한 tungsten(W), silicon dioxide(SiO_2)로 모델링 하였으며, 입자 및 표면재료는 elastic-isotropic material로 구성하였다. 또한, 패드의 재

Fig. 1. A finite element model used in this study for analyzing the direct 3-body contact.

Table 1. FE simulation conditions and material properties of slurry fluid

Particle	Shape : Sphere Diameter : 100 nm
Slurry fluid	Slightly compressive flow Viscosity : 0.0015 Pa·sec (at 20°C) Density : 1.5 g/cm ³
Simulation Conditions	Pressure : 0.04 MPa Wafer moving speed : 1 m/s Temperature : 20°C

질은 실제 공정에서 사용되는 폴리우레탄(polyurethane)으로 모델링하였고, 앞서 언급한 대로 미세공극을 포함하여 연마입자가 공극내에서 공정중에 어떠한 거동을 하는지 파악하였다. 폴리우레탄 패드내 공극은 수백 마이크로 크기로부터, 연마입자 1개의 크기와 유사한 수백 나노미터 크기도 존재하므로, 본 연구에서는 연마입자 1개가 입자 스케일, 즉 연마입자와 유사한 수백나노미터 크기의 미세공극내에 놓였을 때를 모델링하여 시뮬레이션 하였다.

실제 CMP공정에서와 같이 일정한 압력하에서 웨이퍼 표면이 일정속도로 움직이고 이에 따라 슬러리 유동이 유발되는 조건하에서 해석을 수행하였다. 슬러리 유체는 일반적으로 많이 사용되는 KOH계 fumed silica기반 염기성용액의 물성을 이용하였다. 또한, 슬러리 유체는 외부압력하에서의 매우 좁은 미세채널 내에서의 유동이며 실제 유체에서 매우 작지만 밀도변화가 존재함을 감안하여 극소 압축성 유동(slightly compressible flow)으로 모델링하였다. 해석을 위한 경계조건으로서, 슬러리 유체와 접촉하는 입자와 패드, 웨이퍼 표면의 유한요소들에 FSI 경계조건을 부여하였다. Table 1 및 2에 해석 조건 및 해석에 사용된 재료

Table 2. Mechanical properties of the particle and wafer surface used in the simulation

	Material	Young's modulus (GPa)	Poisson's ratio	Density (g/cm ³)
Wafer surface	Cu	135	0.33	8.95
	W	411	0.28	19.2
	SiO ₂	70	0.2	2.0
Particle	SiO ₂	70	0.2	2.0
Pad	Polyurethane	2.29 (MPa)	0.49	0.748

물성치를 요약, 제시하였다.

압력, 속도, 유체점도는 실제 현업에서 사용되는 공정조건을 참고하여 설정하였고, 재료물성치는 역시 현업에서 사용되는 재료물성 및 기존의 연구결과와 참고 문헌으로부터 수집되었다[10,11].

3. 결과 및 고찰

Fig. 2는 구리(Cu) 웨이퍼와 실리카(silica) 입자, 폴리우레탄 패드간 접촉모델에서의 시뮬레이션 결과로서, 미세공극 내에서의 입자의 주요 거동을 timestep에 따라 보여주는 snapshot이다. 제시된 결과로부터, CMP공정중에 연마입자가 패드와 웨이퍼 사이에서 상하로 계속 운동하면서 패드와 웨이퍼 표면과 계속적으로 접촉함을 알 수 있다. 초기에는, 웨이퍼에 작용되는 외부압력에 의해 폴리머패드가 변형되면서 미세공극내의 입자가 아래 패드쪽으로 움직인다(Figs. 2(a),(b)). 시간이 지남에 따라 압력에 의해 변형이 계속 발생하여 웨이퍼가 패드와 직접 접촉하게 되고 이에 따라 입자가 폴리머패드의 탄성에 의해 되튀겨지며 윗방향 웨이퍼쪽으로 움직이다가 시간이 경과후 다시 아래 패드쪽으로 이동한다(Figs. 2(c)). 입자는 접촉계면내에서 위 아래로 움직이며 이러한 접촉 양상을 반복한 뒤에 결국 패드에 대변형을 일으키며 미세공극내에 완전히 고착되는 거동을 보인다(Fig. 2(d)).

이와 같은 입자의 거동에 의해 Fig. 2(c)에 보이듯이 구리 웨이퍼표면에 발생하는 최대 접촉응력은 약 490 MPa으로 나타나는데, 이러한 응력은 구리의 항복강도(30~260 MPa)를 고려해 볼때 표면에 소성변형을 유발하여 피팅(pitting)과 같은 표면파괴가 일어날 수 있고, 실제 CMP 공정중에는 웨이퍼에 수많은 비구형

Fig. 2. Snapshots of the simulation results (silica particle, Cu wafer, polyurethane pad) ; after the time steps of (a) 340, (b) 1130, (c) 2910, and (d) 3320, respectively.

(non-spherical shape) 입자와의 반복적인 접촉이 일어나고 입자간 뭉침(agglomeration)이 발생하는 것을 고려하면, 다양한 표면 미세결함이 충분히 발생할 수 있음을 확인할 수 있다. 입자가 미세공극내에 고착된 후에는 폴리머 패드는 마치 연마포와 같은 상태가 되어 더 큰 표면파손과 결함뿐만 아니라 연마가공이 일어나게 될 것임을 알 수 있다.

이러한 결과는 CMP공정중에 패드와 입자의 접촉거동과 그 결과로 형성되는 패드-입자 혼합상태(pad-particle mixture)와 그 발생 메커니즘을 제시한 첫 관찰이라는 점에서 매우 큰 의미가 있다. 즉, 이는 CMP공정중 폴리우레탄 패드에 연마입자들이 고착, 침투됨으로써 결과적으로 폴리우레탄 패드의 기계적 물성이 변화하여, 공정전과 비교할 때 패드가 훨씬 경화(hardening)된다는 것을 뜻한다.

이러한 입자 혼합패드는 최근 CMP공정의 주요 이슈로서 부각되고 있는 공정후 표면에 발생하는 표면결함중 하나인 미세스크래치(micro-scratch)를 발생시키는 주요 원인이 될 수 있다. 잘 알려진대로, CMP공정중에 금속계열의 웨이퍼 표면에서는 슬러리의 화학적 작용에 의해 기계적 성질이 저하되고 연화현상(softening)이 발생한다. 따라서, 연화된 웨이퍼 표면에 입자가 혼합된 경화된 패드의 접촉은 더 쉽게 미세스크래치를 생성시킬 수 있음을 예측할 수 있다.

CMP공정중에 발생하는 이러한 연마입자의 패드로의 침투 및 고착현상에 대하여 최근들어 몇몇 소수의

Fig. 3. Snapshots of the simulation results (silica particle, W wafer, polyurethane pad) ; after the time steps of (a) 190, (b) 1030, (c) 1070, (d) 1080, respectively.

실험적 고찰들이 보고되고 있는데[12,13], 이들 실험적 고찰에서는 실험후 패드 표면 미세구조에 대한 다양한 화학적 및 이미지 분석을 통하여 패드-입자의 혼합상태로 해석하거나 공정중에 패드표면이 입자에 의해 코팅되는 현상으로 해석하고 있다. 본 연구결과는 이러한 실험결과들과 잘 일치하며, 또한 그러한 결과들에 합리적인 근거를 제공해 준다. 본 시뮬레이션 연구결과를 통하여, CMP공정중에 패드와 입자간 상호접촉에 의해 패드표면에 입자가 코팅되는 것이 아니라 패드내에 입자가 침투하여 고착되면서 입자-패드의 혼합물상태로 보는 것이 더 타당한 해석임을 확인할 수 있다.

따라서, 본 결과로부터 폴리머 패드의 탄성, 경도, 횡방향 접촉강성과 같은 기계적 물성 및 패드의 표면형상이 공정중 미세결함 발생에 미치는 영향이 매우 큰 것으로 판단되며, 이에 대한 체계적인 연구가 필요하다.

이러한 입자의 거동에 의한 입자 혼합패드의 형성은 질화규소(Si_3N_4), 이산화규소(SiO_2), 텅스텐(W)과 같은 경질 웨이퍼에 대해서도 유사하게 나타났다. Figs. 3, 4에 텅스텐 웨이퍼 및 실리카 웨이퍼에 대한 시뮬레이션 결과를 제시하였다.

금속 CMP와 oxide CMP의 연마 메커니즘은 재료의 차이에 의해 직접 비교할 수 없으나, 실제 공정에서 동일한 abrasive를 사용할 경우 구리와 텅스텐과 같은 금속계열의 경우 oxide계열인 SiO_2 또는 Si_3N_4 에 비해 미세스크래치 발생이 현저히 많이 나타난다[10]. 이에 대해 아직까지 명확한 근거는 밝혀져

Fig. 4. Snapshots of the simulation results (silica particle, silica wafer, polyurethane pad) ; after the time steps of (a) 190, (b) 530, (c) 4830, (d) 7320, respectively.

있지 않으나, 본 연구결과에 의해서 그 이유를 설명할 수 있다.

Figs. 2-4는 동일한 해석조건하에서 입자가 웨이퍼 및 패드와의 interaction을 통하여 패드내로 침투하면서 패드의 mesh element들이 대변형을 일으켜 더 이상 수렴조건을 만족하지 못하게 되어 해석이 종료될 때까지 시뮬레이션을 수행하여 얻은 결과이다. 실제 공정에서는 금속과 oxide CMP는 앞서 언급한대로 slurry, 공정조건 등이 달라서 본 해석처럼 동일한 조건으로 단순히 비교될 수는 없지만, Figs. 2-4의 결과에서 입자가 패드내로 침투되어 해석이 종료되는 시점까지의 소요시간을 비교해보면, 구리와 텅스텐의 금속 계열막의 경우 각각 3320, 1080 timestep으로 oxide계열인 실리카 웨이퍼(7320 timestep)에서 보다 약 2.5~7배 정도까지 빠르며, 따라서 pad-particle mixture 생성이 더 빠르게 이루어짐을 알 수 있다. 즉, 금속막의 표면 산화에 의한 연화와 더불어 더 빠른 pad-particle mixture에 의한 패드의 경화가 금속계열막 웨이퍼에서 스크래치 발생을 증가시키고 있음을 판단할 수 있다.

이상에서 살펴본 결과들을 토대로, 현재 진행중인 여러 개의 입자들이 다양한 표면형상 및 거칠기를 가진 패드와 접촉하는 보다 실제 공정에 가까운 모델을 이용한 시뮬레이션 및 해석이 추가로 이루어진다면, 이러한 입자 혼합패드에 의한 미세 표면결함 발생 메커니즘을 더 명확하게 규명해낼 수 있으며, 이에 따른 미세결함 발생 저감방안을 도출해 낼 수 있을 것으로 기대된다.

4. 결 론

본 연구에서는 2차원 유한요소해석을 통하여 반도체 제조에 필수공정인 기계화학적 연마(CMP) 공정에서의 미세표면결함 발생 메커니즘을 규명하고자 하였다. 이를 위해 실제 공정에서와 같이 미세공극이 존재하는 폴리머 패드내에서의 입자거동을 파악하였다. 시뮬레이션을 통하여, 공정중에 입자-웨이퍼 패드의 상호접촉에 의하여 입자가 패드내로 침투, 고착되면서 패드-입자 혼합상태(pad-particle mixture)가 생성됨을 처음으로 밝혀내었으며, 이러한 패드-입자 혼합은 패드표면을 공정전과 비교할 때 경화시키게 됨을 알수 있었다. 또한, 금속과 oxide CMP는 slurry, 공정조건 등이 달라서 본 해석처럼 동일한 조건으로 단순히 비교될 수는 없지만, 본 유한요소해석 결과는 oxide계열 웨이퍼에서 금속계열 웨이퍼보다 pad와의 상호작용으로부터 발생하는 scratch 빈도수가 낮을 수 있다는 것을 보여주었다.

후 기

이 논문은 2011년도 정부(교육과학기술부)의 재원으로 한국연구재단의 기초연구사업 지원을 받아 수행된 것임(2011-0004489).

참고문헌

1. Eusner, T., Saka, N., and Chun, J. H., et al., "Controlling Scratching in Cu Chemical Mechanical Planarization," *Journal of The Electrochemical Society*, Vol. 156, pp. H528, 2009.
2. Saka, N., Eusner, T., and Chun, J. H., "Scratching by Pad Asperities in Chemical-mechanical Polishing," *CIRP Annals - Manufacturing Technology*, Vol. 59, No. 1, pp. 329-332, 2010.
3. Hung, C.-C., Lee, W.-H., and Chang, S.-C., et al., "Investigation of Copper Scratches and Void Defects after Chemical Mechanical Polishing," *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 47, No. Copyright (C) 2008 The Japan Society of Applied Physics, p. 7073.
4. Chandra, A., Karra, P., and Bastawros, A. F., et al., "Prediction of Scratch Generation in Chemical Mechanical Planarization," *CIRP Annals - Manufacturing Technology*, Vol. 57, No. 1, pp. 559-562, 2008.
5. 김동균, 성인하, "입자연마가공에서의 입자 형상의 영향에 대한 고찰," *한국윤활학회지*, 제26권, 제4호, pp. 219-223, 2010.
6. 양우열, 양지철, 성인하, "입자연마가공에서의 압력 속도 및 유체점도의 영향에 대한 고찰," *한국윤활학회지*, 제27권, 제1호, pp. 7-12, 2011.
7. 박하슬로미, 김옥배, 성인하, "입자연마가공에서의 입자크기 및 충돌각의 영향에 대한 고찰," *한국윤활학회지*, 제27권, 제1호, pp. 34-39, 2011.
8. Bathe, K., Zhang, H., and Ji, S., "Finite Element Analysis of Fluid Flows Fully Coupled with Structural Interactions," *Computers and Structures*, Vol. 72, No. 1, pp. 1-16, 1999.
9. De, S., Hong, J., and Bathe, K., "On the Method of Finite Spheres in Applications: Towards the use with ADINA and in a Surgical Simulator," *Computational Mechanics*, Vol. 31, No. 1, pp. 27-37, 2003.
10. Li, Y. *Microelectronic applications of chemical mechanical planarization*: Wiley-Interscience, 2007.
11. Feng, J., Wang, D., and Liu, H., et al., "Finite Element Simulation of Thermal Stress During Diffusion Bonding of Al₂O₃ Ceramic to Aluminium," *Science and Technology of Welding and Joining*, Vol. 8, No. 2, pp. 138-142, 2003.
12. Yang, J., Oh, D., and Kim, H., et al., "Investigation on Surface Hardening of Polyurethane Pads During Chemical Mechanical Polishing (CMP)," *Journal of Electronic Materials*, Vol. 39, No. 3, pp. 338-346, 2010.
13. Kim, H. J., "Fundamental Studies on the Scratches during CMP", Proceedings of the ICPT(International Conference on Planarization/CMP Technology), Phoenix, USA, 2010.