

구형 연마재에 의한 표면 연마에 관한 분자동역학 시뮬레이션 연구

박병흥*, 강정원**†

*충주대학교 화공생물공학학과 **충주대학교 컴퓨터공학과

Molecular Dynamics Simulations Study on Surface Polishing by Spherical Abrasive

Byung Heung Park*, Jeong Won Kang**† ,

*Department of Chemical and Biological Engineering, Chungju National University

**†Department of Computer Engineering, Chungju National University

Abstract

We investigated the substrate surface polishing by the spherical rigid abrasive under the compression using classical molecular dynamics modeling. We performed three-dimensional molecular dynamic simulations using the Morse potential functions for the various slide-to-roll ratios, from 0 to 1, and then, the compressive forces acting on the spherical rigid abrasive were calculated as functions of the time and the slide-to-roll ratio. The friction coefficients obtained from the classical molecular dynamics simulations were compared to those obtained from the experiments; and found that the molecular dynamic simulation results with the slide-to-roll ratio of 0 value were in good agreement with the experimental results.

Key Words : Chemical Mechanical Polishing, Molecular Dynamics, Semiconductor Processes

1. 서 론

Chemical mechanical polishing (CMP) 공정은 최근 산업 전반에 걸쳐 그 응용 범위가 점차 증가하고 있으며, 차세대 나노 구조 제작의 핵심기술이 될 것으로 전망되고 있다. 특히 이 기술은 초미세 반도체 공정에 있어서 핵심기술로 자리 잡고 있는 실정이다 [1-7]. 지금까지 CMP 공정 기술의 발전은 주로 경험에 의해 이루어져 왔으며 CMP 공정상의 연마마모에 대한 이해는 기계적 모델링과 시뮬레이션을 통하여 이루어지고 있다.

CMP공정상의 MRR (Material Removal Rate)를 예측하기 위하여 여러 연구자들에 의해 이론적인 모델들이 제시되어 왔다 [8-10]. Preston [8]에 의한 모델은

유리 연마를 위해 만들어 졌으나 CMP모델링에도 적합하다고 알려져 있다. Tseng and Wang [9]은 Hydrodynamic boundary layer와 Hertzian penetration model을 결합하여 새로운 모델을 제안하였다. Shi [10]는 particle penetration과 pad elasticity를 고려하여 다른 모델을 제안하였다.

본 논문에서는 연마패드, 슬러리 속의 연마용 구형 나노 입자와 기판 표면 사이의 상호작용을 포함하는 분자동역학 시뮬레이터 개발을 통해 연마입자의 운동을 살펴보고 CMP 공정에서의 연마마모 현상에 대하여 이해하고자 한다. 이전 연구[11]에서는 연마재가 표면으로부터 2.5Å 깊이로 진행되는 경우에 대하여 연구하였다. 그러나 실제 CMP 공정에서는 다양한 깊이에서 공정이 이루어지게 되는 것은 당연한 현상일 것이다. 따라서 본 연구에서는 연마재가 표면으로부터 다양한 깊이로 진행되는 경우에 대하여 연구하고 마찰계수 등을 연구한다.

†E-mail : jwkang@cjnu.ac.kr

2. 연구 방법

본 연구에서는 이전 연구[11]에서 사용한 구조와 같은 기관 원자 구조 및 연마제 원자구조를 사용하여 3차원 CMP 분자동역학 시뮬레이션을 수행하였다. 기관은 구리를 사용하였으며, 연마입자는 다이아몬드를 사용하였다. 이전연구와 같이 구형 다이아몬드 연마입자는 구리 기관에 삽입되어 미끄러짐, 구름, 반 미끄러짐 또는 반 구름 작용을 하는 것으로 가정하였다. 기관은 총 54080개 구리 원자로 구성되어 있으며 다이아몬드 구형 연마입자는 총 5882개의 원자로 구성되었다. 구리 기관은 면심입방격자구조를 가지며 격자 상수는 3.61Å이고 [100] 방향이다. 연마입자는 다이아몬드 구조를 가지며 격자 상수는 3.56 Å이다.

시뮬레이션 수행과정에서 경계에 위치한 원자들은 고정되었으며, 경계 영역의 2개의 버퍼 원자층에는 통제역학이 적용되어, 기관이 일정한 온도와 압력을 유지하도록 하였다. 연마 입자의 반지름은 20Å이며 기관의 x, y, z축 방향 크기는 143, 92, 45Å이다. 연마입자는 강체로 고려하여 시뮬레이션 하지 않았다. 구리 기관에 사용한 전위함수와 구리-탄소 상호작용에 사용한 전위함수는 Morse 전위에너지 함수이다. 구리-구리 상호작용을 위한 Morse 전위에너지 함수의 변수 α 는 1.3588, D_e 는 0.3429, r_e 는 2.866을 사용하였다[12]. C-Cu 상호작용을 위한 Morse 전위에너지 함수의 변수 α 는 1.7, D_e 는 0.1, r_e 는 2.2을 사용하였다[12]. 운동방정식을 위하여 Velocity-Verlet 알고리즘을 사용하였다 [12]. Velocity-Verlet에 사용된 시간 간격은 0.5fs이다. 연마입자의 진행속도는 62.5 m/s를 사용하였다. Slide-to-roll ratio (S)는 연마입자의 선속도 v_a 와 연마입자의 기관 위를 구르는 속도인 v_r 를 사용하여 $S = (v_a + v_r) / (v_a - v_r)$ 와 같이 표현된다.[11] S 는 0일 때 완전히 기관 위를 구르고 있으며, 1일 때 기관 위를 완전히 미끄러지는 움직임을 의미한다. 연마입자의 연마 깊이와 S 의 변화를 주면서 연마입자가 기관으로부터 받는 힘과 기관의 상태를 조사하였다.

3. 결과 및 토의

Fig. 1은 연마 깊이 5Å으로 구형 연마제가 각각 서로 다른 비율로 미끄러짐과 구름의 비율을 가질 때의 단면도이다. 선으로 표현된 부분은 원자의 밀도가 높은 지역을 보여주고 있다. 구름과 미끄러짐의 비율에 따라 원자의 밀도가 높은 지역이 다름을 보여주고 있는데 이는 구형연마제의 구름에 영향을 받기 때문이다. 이

밀도 차이에 의해 구형 연마제의 진행 방향으로의 저항력의 차이가 생기게 된다. Fig. 2는 S 값에 따라 연마된 표면을 보여주고 있다. 각각의 경우에 대한 그림에서 윗부분에 나타나는 표면 그림에서는 기관이 받는 스트레스를 간접적으로 볼 수 있으며 아래 부분에 나타나는 기관 표면의 3차원 이미지에서는 연마된 후의 기관 모양을 보여주고 있다. 각 그림에서 볼 수 있는 연마제 진행 축 방향으로의 원자의 밀도를 보게 되면 S 값에 따른 진행 방향 축으로의 저항력을 설명할 수 있다.

이전 연구[11]의 연마 깊이가 2.5 Å일 때와 비교하면 이번 연구 결과는 동일한 경향성을 가진다. 회전하면서 움직이는 것이 아니라 어딘가에 붙어 표면 위를 구르지는 않고 문지르면서 지나가게 될 때 수직 방향의

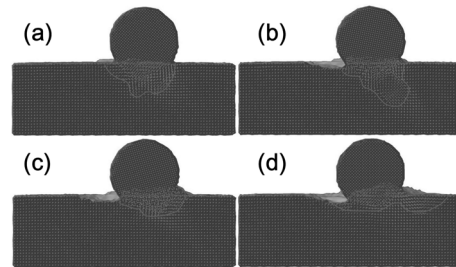


Fig. 1. The cross-sectional views for S ratios with depth = 5 Å. (a) $S = 0$ (b) $S = 0.2$ (c) = 0.5 (d) $S = 1.0$.

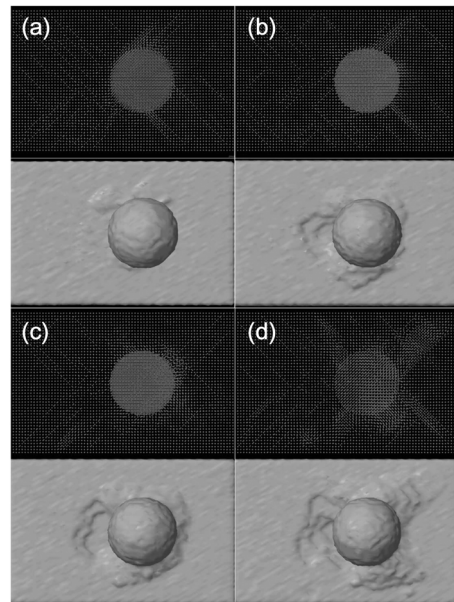


Fig. 2. The top views for S ratios with depth = 5Å. (a) $S = 0$ (b) $S = 0.2$ (c) = 0.5 (d) $S = 1.0$.

저항력이 가능 작게 되며 진행 방향 축으로는 반대의 효과가 나타나고 있다. 같은 5\AA 의 깊이로 연마가 진행되었지만 연마가 진행되고 난 이후의 연마 깊이는 S 값에 따라 다른 결과를 보여주었다. S 값이 0인 경우 가장 연마된 깊이가 낮았으며 S 값이 커질수록 연마된 깊이도 커졌다. 이는 S 값에 따라 z 방향으로 받는 힘의 차이에 의해 알 수 있다. S 값이 작을수록 z 축으로 받는 힘이 크다. 이는 z 축 방향으로 더 많은 압축이 일어났다는 것을 의미한다. 압축되었던 것이 연마입자가 x 축 방향으로 진행에 감에 따라 복원되어 가면서 다시 제자리를 찾아 가는 입자가 더 많다는 것을 의미한다. 즉 실제 연마되는 깊이는 같은 깊이로 연마 입자가 진행하더라도 S 값이 클수록 더 크다는 것을 알 수 있다.

Figs. 3-5의 그래프는 연마재 깊이가 $5, 7.5, 10\text{\AA}$ 일 때, 연마재의 깊이에 따른 연마재 진행 방향으로 연마재가 받는 힘과 수직 방향으로 연마재가 받는 힘을 S 값의 변화에 따라 보여주고 있다.

Figs. 3(a), 4(a), 5(a)의 그래프에서 모두 동일하게 진행방향으로 힘이 증가하다가 기관 원자 구조가 이완되면서 구조적으로 일정부분 안정되면서 힘이 급격하게 감소하는 현상들을 보여주는데, 이와 같이 시간에 따라 힘이 요동치는 현상은 나노미터 영역에서 구형 연마재와 기관 표면 사이에서 slip-stick 현상이 나타나고 있다는 것을 보여주는 것이다.

Fig 6(a)와 6(b)는 연마입자의 연마 깊이에 따른 진

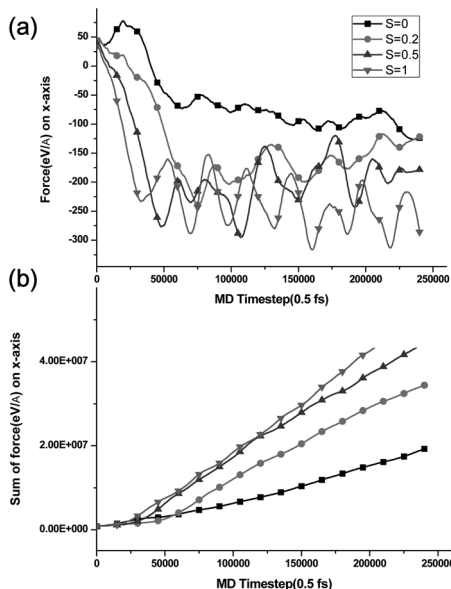


Fig. 3. Forces on x-axis (a) and z-axis (b) as a function of the time for different S values with depth = 5\AA .

행 축 방향의 평균 힘과 수직 축 방향의 평균 힘을 보여주고 있다. S 값의 변화에 따라 연마 깊이가 다름에도 서로 같은 힘을 가지게 되는 경우를 볼 수 있다. 이는 연마패드에 가해지는 압력이 같음에도 S 값에 따라 같은 깊이로 연마되는 것을 의미한다.

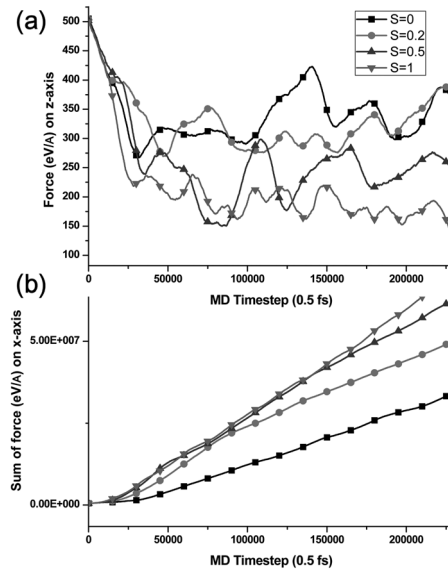


Fig. 4. Forces on x-axis (a) and z-axis (b) as a function of the time for different S values with depth = 7.5\AA .

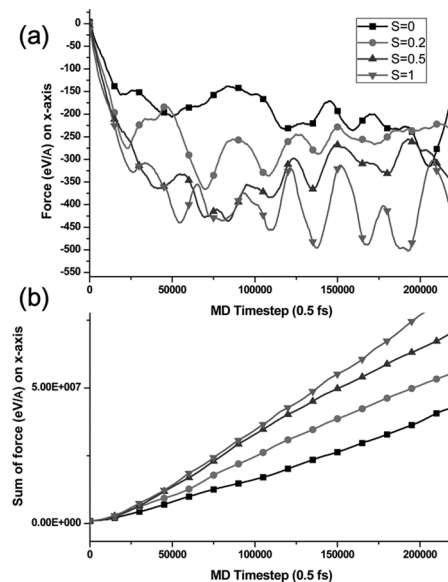


Fig. 5. Forces on x-axis (a) and z-axis (b) as a function of the time for different S values with depth = 10\AA .

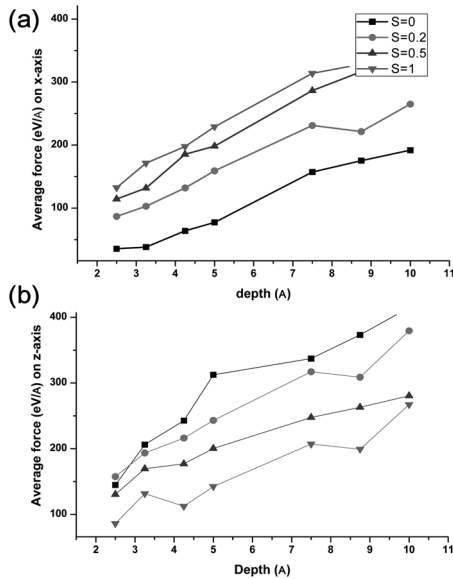


Fig. 6. Average forces on x-axis (a) and z-axis (b) as a function of the depth for different S values.

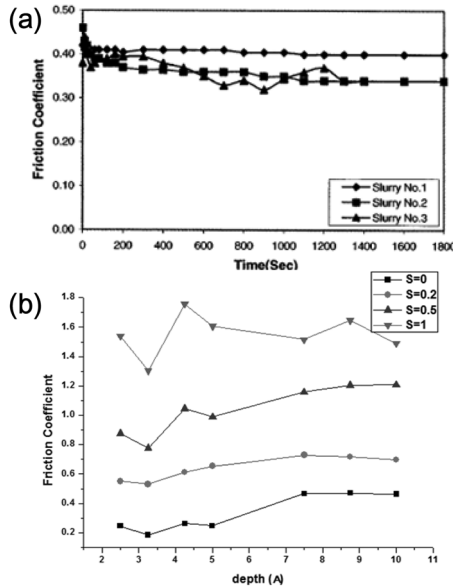


Fig. 7. Friction coefficients in experiments (a) and simulations as a function of the depth for the different S in Simulations.

Fig 7(a)는 CMP 실험에서 구한 마찰계수 값이며 Fig 7(b)는 분자동역학 시뮬레이션을 통해 구한 마찰계수 값이다. 그림 7a에 나타난 것과 같이 CMP 실험에서 얻어지는 마찰계수 값은 0.3에서 0.5사이에 존재하고 있다. 이는 분자동역학 시뮬레이션에서 얻어지는

값과 비교하면 slide-to-roll ratio값이 0 일 때 연마 깊이가 7Å 이상에서 얻어지는 마찰계수 값과 잘 일치한다. 따라서 본 연구의 분자 동역학 시뮬레이션과 실험 결과를 비교할 때, 오차를 고려하더라도 실제 실험에서의 slide-to-roll ratio 값이 0.2이하가 될 것으로 예측해 볼 수 있는 것이다. 그러나 실제 실험 상황과 더욱 일치하는 조건에서 시뮬레이션 결과를 얻기 위해서는 연마패드까지 고려하는 3차원 분자 동역학 시뮬레이션 수행함으로써 얻어질 수 있으며, 따라서 본 연구자는 이러한 연구를 향후 연구를 통하여 수행할 계획이다.

4. 결 론

본 논문에서는 구형 연마재와 기판 사이에서 일어나는 현상을 분자 동역학 시뮬레이션 수행함으로써 다양한 연마 깊이와 연마재의 slide-to-roll ratio에 따라서 연구하였다. 분자동역학 시뮬레이션은 Morse 전위 에너지 함수 기초로 CMP 공정에서 나노미터 영역에서 일어나는 연마재와 기판 사이 상호작용을 통하여 마찰계수 값을 구하였다. 시뮬레이션으로부터 얻어진 마찰계수 값은 실험으로부터 관측된 마찰계수 값과 비교할 때 slide-to-roll ratio가 0일 때 연마 깊이가 7 Å 이상에서 값과 일치하였다. 이번 연구 결과는 향후 실험 조건과 일치하는 조건에서 원자 구조 및 원자간 전위 함수 등을 고려함으로써 실제 실험에서 일어나는 현상에 대한 기초 학문적 정보를 제공할 수 있을 것으로 사료된다.

참고문헌

1. R. K. Singh and R. Bajaj, "Advances in chemical mechanical planarization", MRS Bulletin, Vol. 27, No. 10, pp. 743, 2002.
2. R. K. Singh, S.-M. Lee, K.-S. Choi, G. B. Basim, W. Choi, Z. Chen, and B. M. Moudgil, "Fundamentals of slurry design for CMP of metal and dielectric materials", MRS Bulletin, Vol. 27, No. 10, pp. 752, 2002.
3. R. Bajaj, A. Zutshi, R. Surana, M. Naik, and T. Pan, "Integration challenges for CMP of copper", MRS Bulletin, Vol. 27, No. 10, pp. 776, 2002.
4. D. Evans, "The future of CMP", MRS Bulletin, Vol. 27, No. 10, pp. 779, 2002.
5. 이경진, 김상용, 서용진, "반경험적인 실험설계 기법을 이용한 CMP 공정 변수의 최적화", 전기전자재료학회논문지, 제15권, 제11호, pp. 932, 2002.

6. 김철복, 김상용, 서용진, “기계화학적 연마를 이용한 트렌치 구조의 산화막 평탄화”, 전기전자재료학회논문지, 제15권, 제10호, pp. 832, 2002.
 7. 박창준, 김상용, 서용진, “실리카 슬러리의 희석과 연마재의 첨가가 CMP 특성에 미치는 영향”, 전기전자재료학회논문지, 제15권, 제10호, pp. 844, 2002.
 8. F. Preston, “The theory and design of plate glass polishing machines”, J. Soc. Glass Technol., Vol. 11, pp. 214, 1927.
 9. W. T. Tseng and Y. L. Wang, “Re-examination of pressure and speed dependence of removal rate during chemical mechanical polishing processes”, J. Electrochem. Soc., Vol. 144, pp. L15, 1997.
 10. F. G. Shi and B. Zhao, “Modeling of chemical-mechanical polishing with soft pads”, Appl. Phys. A, Vol. 67, No. 2, pp. 249, 1998.
 11. 강정원, 최영규, “분자동역학 시뮬레이션을 이용한 나노스케일 표면 질삭에 관한 연구”, 반도체디스플레이기술학회지, 제10권, 제3호, pp. 49, 2011.
 12. M. P. Allen and D. J. Tildesley, “Computer Simulation of Liquids”, Oxford, Clarendon, pp. 71, 1987.
-
- 접수일: 2011년 11월 8일, 1차심사일: 2011년 11월 24일,
2차심사일: 2011년 12월 8일, 게재확정일: 2011년 12월 15일