

## CMP 공정에서 연마패드 경도에 따른 연마 특성 변화 분자동역학 연구

권오근\* · 최태호\*\* · 이준하†

\*세명대학교 전자공학과, \*\*상명대학교 컴퓨터정보통신공학과,

†상명대학교 컴퓨터시스템공학과

### Molecular Dynamics Study on Property Change of CMP Process by Pad Hardness

Oh Kuen Kwon\*, Tae Ho Choi\*\* and Jun Ha Lee†

\*Department of Electronic Engineering, Semyung University

\*\*Department of Computer Information Telecommunication Engineering, Sangmyung University

†Department of Computer System Engineering, Sangmyung University

#### ABSTRACT

We investigated the wearable dynamics of diamond spherical abrasive during the substrate surface polishing under the pad compression via classical molecular dynamics modeling. We performed three-dimensional molecular dynamics simulations using the Morse potential functions for the copper substrate and the Tersoff potential function for the diamond abrasive. The pad hardness had a big impact on the wearable dynamics of the abrasive. The moving speed of the abrasive decreased with increasing hardness of the pad. As the hardness decreased, the abrasive was indented into the pad and then the sliding motion of the abrasive was increased. So the pad hardness was greatly influenced on the slide-to-roll ratio as well as the wearable rate.

**Key Words** : Chemical mechanical polishing, Molecular dynamics, Semiconductor processes

## 1. 서 론

Chemical mechanical polishing (CMP) 공정은 화학적 작용과 물리적 작용을 이용하여 기판상에 도포된 산화막이나 금속 박막을 연마하여 평탄화 하거나 표면을 제거하는 공정으로, 소재 및 전자 산업 전반에서 널리 활용되고 있는 공정이다. 특히 반도체공정에서 구리 Dual 다마신 공정의 핵심이며 차세대 나노 구조 제작의 핵심기술이다[1-7]. 구리 CMP 공정은 금속막에 대한 연마 공정으로 Dual 다마신 기술이 수율에 매우 민감하게 영향을 미치고 있어 CMP 공정 기술은 초미세 반도체 공정에 있어서 핵심기술로 자리 잡은 공정이다.

CMP 공정 기술의 발전은 대체로 실험을 통한 경험적으로 유추 하는 방법으로 이루어져 왔다. 연마 마모

에 대한 이해는 대체로 기계적 모델링과 단순한 시뮬레이션에 의하여 이루어지고 있는 것이 현실이다. 지금까지 CMP공정상의 연마율을 예측하기 위하여 여러 연구자들에 의해 이론적인 모델들이 제시되어 왔다[8-10]. Preston[8]에 의한 모델은 유리 연마를 위해 만들어졌으나 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. 이러한 모델들은 대부분 Preston 방정식에 따르고 있으며 연마율은 압력과 속도의 곱에 비례하는 것으로 제안하고 있다.

그러나 지금까지 연마패드의 경도에 따른 연마의 특성 변화에 관한 원자단위 이론적인 연구를 수행되어지지 않았다. 일반적으로 연마패드의 경도가 약해짐에 따라서 연마입자가 기판에 삽입되는 깊이보다 상부의 연

†E-mail : junha@smu.ac.kr

마패드에 삽입되는 깊이가 더 커질 것이라는 것은 추론해볼 수 있다. 이러한 연마패드의 경도의 차이에 따라서 연마제의 기관 삽입 깊이의 차이가 나타나고, 이러한 차이는 연마입자의 연마작용운동에 다르게 영향을 미치게 될 것으로 추론하는 것을 타당하다. 그러나 지금까지 이에 대한 심도 깊은 연구는 수행된 바가 없다. 따라서 본 논문에서는 다양한 경도를 가지는 연마패드에 가해지는 압력에 따른 연마입자의 운동의 차이를 분자동역학 시뮬레이션을 통하여 연구 한다.

## 2. 연구 방법

Fig. 1은 연마과정에서 연마패드의 경도와 압력에 따른 연마제의 이동거리를 알기 위한 분자동역학 시뮬레이션 연구를 위한 원자단위 구조이다. CMP공정상의 연마패드는 폴리우레탄등의 폴리머로 구성이 되지만 이번 시뮬레이션에서는 구리와 같은 결합거리를 갖는 가공의 물질로 대체하여 실험하였다. 경도 변화는 Morse potential의  $D_e$ 값의 변화를 주어 구현하였다. 첫 번째로 같은 높이로 패드를 움직여 가공하는 경우를 고려하였다.

본 연구에서는 Fig. 1에서 제시한 구조와 같은 기관 원자 구조 및 연마제 원자구조를 사용하였으며, 상부의 연마패드는 기관과 동일한 구조를 가지는 구조로 가정하였다. 분자동역학 시뮬레이션은 3차원 구조에 대해서 수행되었다[11]. 구리 기관을 사용하였으며, 다이아몬드 구조를 가지는 구형의 연마입자를 사용하였다. 구형 다이아몬드 연마입자는 구리 기관에 다양한 깊이로 삽입되어 자유롭게 운동하도록 가정하였다. 기관은 총 54080개 구리 원자 면삽입방격자구조로 구성되었으며 다이아몬드 구형 연마입자는 지름  $28 \text{ \AA}$  총 5882개의 원자로 구성되었고, 연마패드는 총 13520개 구리 원자 면삽입방격자구조로 구성되었다. 시뮬레이션 수행과정에서 기관 바닥 경계에 위치한 원자들은 고정되었으며,

경계 영역의 2개의 버퍼 원자층에는 통계 역학이 적용되어, 기관에 작용된 압력에 의하여 온도상승이 발생하였을 경우에 열에너지의 외부로의 발산이 일어나도록 하는 역할과 압력의 분산효과를 가져오도록 작용하게 하였다. 연마입자의 반지름은  $20 \text{ \AA}$ 이며 기관의  $x, y, z$  축 방향 크기는  $143, 92, 45 \text{ \AA}$ 이다. 연마입자는 분자동역학 시뮬레이션을 통하여 자유롭게 움직이도록 하였다.

구리 기관에 사용한 전위함수와 구리-탄소 상호작용에 사용한 전위함수는 Morse 전위에너지 함수이다. 구리-구리 상호작용을 위한 Morse 전위에너지 함수의 변수  $\alpha$ 는  $1.3588$ ,  $D_e$ 는  $0.3429$ ,  $r_e$ 는  $2.866$ 을 사용하였다 [12]. C-Cu 상호작용을 위한 Morse 전위에너지 함수의 변수  $\alpha$ 는  $1.7$ ,  $D_e$ 는  $0.1$ ,  $r_e$ 는  $2.2$ 을 사용하였다. 연마입자는 Tersoff potential을 이용하여 시뮬레이션 하였다. 운동방정식을 위하여 Velocity-Verlet 알고리즘을 사용하였다[13]. Velocity-Verlet에 사용된 시간 간격은  $0.5 \text{ fs}$ 이다. 연마 패드와 기관 사이의 상대속도는  $62.5 \text{ m/s}$ 를 사용하였다.

## 3. 결과 및 토의

Fig. 2는 초기 연마입자의 깊이가  $7.5 \text{ \AA}$  인 경우에 Morse potential의  $D_e = 0.343$ 일 때의 상부의 패드가 이동한 이후의 원자단위 모양을 보여준다. Fig. 3은 초기 연마입자의 깊이가  $7.5 \text{ \AA}$  인 경우에 Morse potential의  $D_e = 0.1715$ 일 때의 상부의 패드가 이동한 이후의 원자단위 모양을 보여준다.  $D_e$ 값이 클수록 상부의 연마패드의 경도가 약해지는 것을 의미하는데, 연마패드의 경도가 약해짐에 따라서 다이아몬드 연마입자가 기관에 삽입되는 깊이보다 상부의 연마패드에 삽입되는 깊이가 더 커진다는 것을 분명히 확인할 수 있다. 이러한 연마패드의 경도의 차이에 따라서 다이아몬드 연마입자의 운동이 다르게 나타나게 될 것으로 예상하는 것을 당연한 것으로 사료된다.

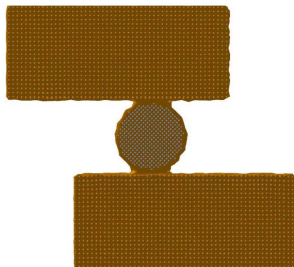


Fig. 1. Simulation structure.

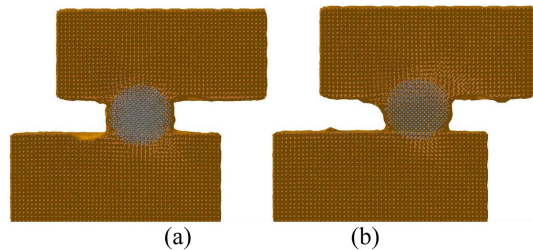


Fig. 2. Simulation results for (a)  $D_e = 0.343$  and (b)  $D_e = 0.1715$ .

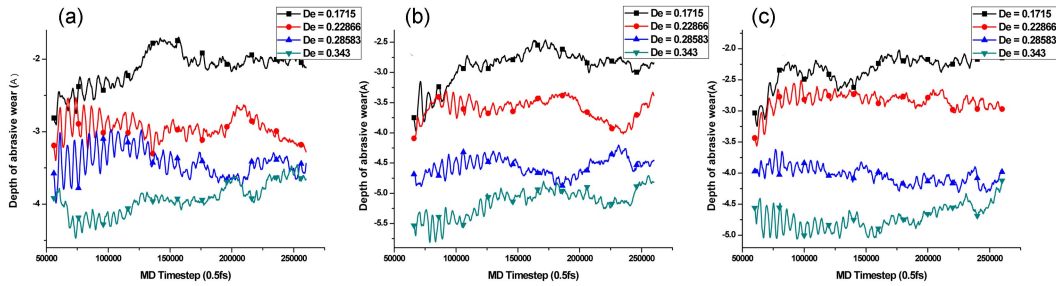


Fig. 3. Depths of abrasive as a function of the MD time for different De values with initial depth of (a) 7.5 Å, (b) 10 Å, and (c) 12.5 Å.

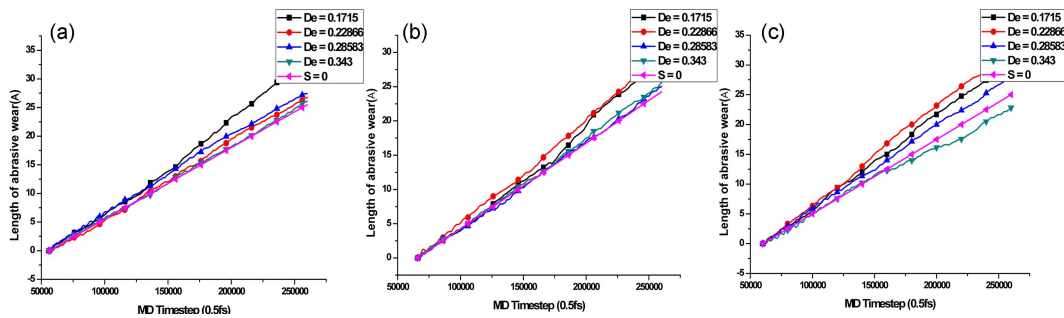


Fig. 4. Moving distance of abrasive as a function of the MD time for different De values with initial depth of (a) 7.5 Å, (b) 10 Å, and (c) 12.5 Å.

그러므로 연마패드의 경도에 따른 연마입자의 운동 특성을 상세하게 살펴보았다. Fig. 4(a)는 초기 연마입자의 삽입 깊이가 7.5 Å 인 경우에 Morse potential의 De 값이 0.1715, 0.22866, 0.28583, 0.343일 때 시간에 따른 연마입자에 표면제거에 관여하는 연마입자의 깊이의 변화를 보여준다. Fig. 4(b)와 Fig. 4(c)는 초기 연마입자의 깊이가 10 Å 과 12.5 Å 일 때의 연마입자의 깊이에 대한 결과이다. Fig. 4에서 De값이 증가함에 따라서 연마입자의 깊이가 더 크게 나타나는 것을 볼 수 있다. 이는 연마패드가 단단할수록 가해지는 동일한 압력에 대하여 연마입자가 더 깊숙이 기판에 삽입될 것으로 사료되는 결과와도 잘 일치하는 것이다. Fig. 5(a)는 Fig. 4(a)의 결과를 보이는 것과 같은 시뮬레이션 결과들에서 시간의 변화에 따라서 연마입자가 연마패드의 움직이는 방향으로 이동한 거리를 De값에 따라서 비교하여 보여주고 있다. Fig. 5(b)와 Fig. 5(c)는 초기 연마입자의 깊이가 10 Å 과 12.5 Å 일 때의 연마입자의 깊이에 대한 결과이다. De값이 작은 경우인 연마패드의 경도가 낮은 경우에 연마입자가 더 많이 이동한 것을 볼 수 있다. slide-to-roll ratio S 값은 연마입자의 구름작용의 정도를 나타내는 것으로 S값이 0인 경우는 구름작용이 일어나지 않는 것을 의미하고 S값이

1인 경우는 구름작용만 일어나고 미끄러짐 작용이 일어나지 않는 것을 의미한다. Fig. 5(a)에서 연마패드의 경도가 높은 경우로 가정된 De = 0.343일 때에는 Slide-to-Roll ratio S 값이 0인 경우와 유사한 것을 볼 수 있다. 이는 연마입자가 구름작용이 없는 미끄러짐 작용이 주요하게 일어나는 것을 알 수 있게 한다. 이러한 경향들은 Fig. 5(b)와 Fig. 5(c)에서도 유사한 것을 볼 수 있다. 그러나 이동거리가 초기 연마입자 깊이가 깊어질수록 최고 이동거리는 De = 0.22866인 경우 나타났으며, 특별히 초기 연마입자 깊이가 12.5 Å 인 경우인 Fig. 5(c)에서는 De = 0.343일 경우에는 S = 0인 경우보다 이동거리가 적게 나타났다. 이러한 차이는 연마입자의 삽입된 깊이가 깊어 수평방향으로의 연마입자의 움직임을 방해하는 반발력이 컸기 때문인 것으로 사료된다. 특히 Fig. 5를 통하여 3-body 시뮬레이션에서 연마입자의 움직임은 slide-to-roll ratio가 0.1에서 0.3사이의 값을 가지는 것으로 예측할 수 있다. 이는 실제 연마제의 움직임이 미끄러짐과 구름의 작용이 복합적으로 나타나는데, 미끄러짐 작용이 좀더 많은 것을 알 수 있다.

위 시뮬레이션 결과에서 살펴본 바와 같이, 연마패드의 경도가 낮은 연질의 패드를 사용하는 경우가 경

도가 높은 경질의 패드를 사용하는 경우보다 더 많은 거리를 이동하였다. 기관과 동일한 경도를 갖는 연마패드를 가정한 경우에는 초기 연마 깊이가 다름에도 불구하고 동일한 길이만큼 연마 되면서 연마제가 앞으로 전진하기도 하지만 제자리에서 도는 현상 또한 나타났다. 연질의 패드를 사용하는 경우는 연마제가 연마패드를 깊숙이 뚫고 들어가서 연마제의 연마 과정은 2-body 연마 과정과 같은 메커니즘을 가지게 되었는데, 이는 연마패드 안쪽으로 연마제가 삽입이 깊게 일어나 이 연마제가 연마패드에 고정되어서 기관 표면에서 미끄러지면 연마하는 특징을 보였다. 이와 같이 연질의 연마패드에서는 연마제의 움직인 거리가 가장 길어지는 것이었다. 그러나 경질의 연마패드에서는 연마제가 기관에 더 깊이 삽입되기 때문에 연마제의 이동거리는 줄어들지만 연마제로 인해 기관이 연마 되는 양은 경질의 연마패드에서 더 크게 나타나게 되었다. 이때 연마입자가 연마패드에 박혀 미끄러지듯이 연마하게 되는 조건은 기관을 연마할 때 연마입자가 가지게 되는 마찰력 보다 연마패드가 더 이상 연마입자에 의해 연마되지 않으면서 가지게 되는 연마패드의 탄성력이 클 경우에 일어났다.

본 연구의 분자 동역학 시뮬레이션에서 마찰계수 값은 0.3에서 0.6 사이로써 이는 실험적으로 얻어진 0.4와 잘 일치하는 값인 것을 알 수 있다. 그러나 실제 실험 상황과 더욱 일치하는 조건에서 시뮬레이션 결과와 실험결과를 비교하기 위해서는 연마패드의 특성들을 더욱 고려하는 3차원 분자 동역학 시뮬레이션 수행함으로써 얻어질 수 있으며, 따라서 본 연구자는 이러한 연구를 향후 연구를 통하여 수행할 계획이다.

#### 4. 결 론

본 연구에서는 서로 다른 경도를 갖는 연마패드와 다이아몬드 구형 연마입자 그리고 구리 기관을 고려하여 연마패드의 경도를 고려한 분자동역학 시뮬레이션 연구를 수행하였다. 연마입자의 기관 상의 연마 속도는 연질의 연마패드를 사용할 경우 연마입자가 연마패드에 깊숙이 박혀 연마 입자가 구리 기관을 미끄러지듯이 운동하면서 연마하는 것이 가장 빠르다는 것을 알게 되었다. 이때 연마입자가 연마패드에 박혀 미끄러지듯이 연마하게 되는 조건은 기관을 연마할 때 연마입자가 가지게 되는 마찰력 보다 연마패드가 더 이상 연마입자에 의해 연마되지 않으면서 동시에 연마패드의 탄성력이 클 경우에 일어나는 것을 알 수 있었다. 본 논문에서 사용한 3-body CMP 공정 시뮬레이터에서는

기계적인 연마 마모가 고려 되었으나 앞으로 화학작용에 의한 기관의 표면 효과가 더해진다면 완전한 CMP 공정을 시뮬레이션이 가능하고 조건에 따른 최적의 CMP 연마패드 제작 등에 기여 할 수 있을 것이라 생각한다.

#### 감사의 글

이 논문은 2012학년도 세명대학교 교내 학술연구비 지원에 의해 수행된 연구임.

#### 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 challengers 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. K. J. Lee, S. Y. Kim and Y. J. Seo, "Optimization of CMP Process Parameter using Semi-empirical DOE (Design of Experiment) Technique", Journal of KIEEME, Vol. 15, No. 11, , pp. 932, 2002.
6. C. B. Kim, S. Y. Kim and Y. J. Seo, "Semiconductor : Oxide Planarization of Trench Structure using Chemical Mechanical Polishing ( CMP )", Journal of KIEEME, Vol. 15, No. 10, pp. 832, 2002.
7. C. J. Park, S. Y. Kim and Y. J. Seo, "Effects of Diluted Silica Slurry and Abresives on the CMP Characteristics", Journal of KIEEME, Vol. 15, No. 10, 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. J. W. Kang and J. H. Lee, "Multi-Walled Carbon Nanotube Oscillator Behavior Analysis using Classical

- Molecular Dynamics Simulation”, J. of the Korean Physical Society, Vol. 53, No. 2, pp. 646-651, 2008.
12. M. P. Allen and D. J. Tildesley, “Computer Simulation of Liquids”, Oxford, Clarendon, pp. 71, 1987.
13. J. P. Ryckaert, G. Ciccotti and H. J. Berendsen, “Numerical integration of the cartesian equations of motion of a system with constraints:molecular dynamics of n-alkanes”, J. of Computational Physics, pp. 327-341, 1977.
- 
- 접수일: 2013년 3월 4일, 심사일: 2013년 3월 13일,  
게재확정일: 2013년 3월 18일