

## Chemical Mechanical Polishing 공정에 관한 원자단위 반응 모델링

### Atomic Scale Modeling of Chemical Mechanical Polishing Process

변기량<sup>1,a</sup>, 강정원<sup>1</sup>, 송기오<sup>1</sup>, 황호정<sup>1</sup>

(Ki Ryang Byun<sup>1,a</sup>, Jeong Won Kang<sup>1</sup>, Ki Oh Song<sup>1</sup>, and Ho Jung Hwang<sup>1</sup>)

#### Abstract

This paper shows the results of atomistic modeling for the interaction between spherical nano abrasive and substrate in chemical mechanical polishing processes. Atomistic modeling was achieved from 2-dimensional molecular dynamics simulations using the Lennard-jones 12-6 potentials. We proposed and investigated three mechanical models: (1) Constant Force Model; (2) Constant Depth Model; (3) Variable Force Model, and three chemical models, such as (1) Chemically Reactive Surface Model, (2) Chemically Passivating Surface Model, and (3) Chemically Passivating-reactive Surface Model. From the results obtained from classical molecular dynamics simulations for these models, we concluded that atomistic chemical mechanical polishing model based on both Variable Force Model and Chemically Passivating-reactive Surface Model were the most suitable for realistic simulation of chemical mechanical polishing in the atomic scale. The proposed model can be extended to investigate the 3-dimensional chemical mechanical polishing processes in the atomic scale.

**Key Words** : Chemical mechanical polishing(CMP), Molecular dynamics simulations, Modeling and simulation

#### 1. 서 론

나노입자와 기판 표면사이의 상호작용을 기초로 하는 Chemical Mechanical Polishing(CMP) 기술은 최근 산업 전반에 걸쳐 그 응용 범위가 점차 증가하고 있으며, 차세대 나노구조 제작의 핵심기술이 될 것으로 전망되고 있다. 특히 이 기술은 초미세 반도체 공정에 있어서 핵심기술로 자리 잡고 있는 실정이다[1-3]. 이와 같이 CMP 기술의 중요성과 급속한 발전에도 불구하고 아직까지 CMP 공정은 반도체 제반 공정 중에서 일어나는 물리적 화학적 반응에 관한 근본적인 이해가 가장 부족한 영역으로 남아있어 CMP를 이용하는 차세대 나노소자 및 반도체소자 공정개발에 가장 큰 장애요

인이 될 것으로 인식되고 있다[1,2]. CMP 공정을 이해하기 위해서는 그림 1에서와 같이 슬러리 속에 포함되어있는 절삭용 나노입자와 기판표면 사이 상호작용에 관한 더욱 정확한 물리·화학적 반응연구가 필수적이다. 그러나 CMP는 지금까지 학술적 연구에 기초하여 개발되기보다는 산업체에서의 경험적 지식에 주로 의존하여 개발, 발전되어 온 특징으로 인해 공정과정상에 나타나는 여러 가지 현상들에 관한 기본적인 이해가 매우 부족하고 정확한 공정 결과 예측이 어려울 뿐 아니라, 공정 개선을 위한 새로운 방안제시가 더욱 어려워지고 있다. 이와 같은 문제를 해결하기 위해서는 슬러리 속의 절삭용 구형 나노입자와 기판 표면 사이의 상호작용을 포함하는 물리·화학적 현상들이 분자동력학을 이용한 원자단위에서 해석되어야 할 필요가 있다.

대부분의 이전 연구들은 CMP 공정 실제와는 다른 형태의 모델, 즉 AFM 팁 또는 나노미터 영역의 다이아몬드 절단기 등을 이용하여 실리콘 및 금속 표면에 나노 영역 흡집 내기 또는 절단에 관

1. 중앙대학교 전자전기공학부  
(서울시 동작구 흑석동 221)

a. Corresponding Author : byun@semilab3.ee.cau.ac.kr

접수일자 : 2005. 2. 24

1차 심사 : 2005. 3. 16

심사완료 : 2005. 3. 31

한 것이다. 일정 압력 하에서 고정된 물체에 의한 기판 표면 마모 및 평탄화에 관한 것에 기초하여 수행되었다[4-19]. 그러나 CMP의 기술적 중요성을 고려할 때 CMP의 실제와 가장 유사한 일정압력이 작용하는 구형 나노입자와 기판 표면 사이 상호작용 및 고정되어 있지 않고 일정 압력이 작용함과 동시에 이동성 있는 구형 나노입자와 기판 상호작용에 관한 모델 연구가 반드시 수행되어야만 한다.

지금까지 연구된 대부분의 모델은 기계적 표면 평탄화인 Mechanical Planarization(MP)에 관한 연구에 집중되어져 왔으며, 최근에서야 CMP에 관한 연구가 시작되었다[10,12]. 1980년대 후반이후 미국 Lawrence Livermore National Laboratory의 연구자들은 나노영역의 다이아몬드 절단기에 관하여 나노영역에서 분자동력학 시뮬레이션을 수행하기 시작하였으며, 이후 미국과 일본 및 몇몇 나라의 연구자들이 이와 관련된 연구를 수행하여 왔다. 이와 관련된 분자동력학을 적용한 MP 분야에서 최근 연구동향은 참고문헌 [4-6] 과 [13]에 요약 정리되어 있다. 그러나 이러한 연구들은 실제 CMP에서 사용되는 구형 나노입자의 다양한 운동 양식에 따른 특성에 관한 연구가 아니라 나노영역에서 나노 절단기에 의한 표면 구조 변화에 대하여 집중되어있다.

최근 구형 나노입자와 기판 사이의 상호작용에 관한 원자 단위 연구가 수행되었다[11]. 이전의 고정된 팁 모양의 인덴터(indenter)나 절단기 대신 이들은 구형의 인덴터를 사용하여 연구하였으나 일정 압력이 작용하는 구형 나노입자의 이동성에 따른 표면 변화 특성에 관한 연구는 수행되지 않았다. Zhang 과 Tanaka[16]는 다이아몬드 구형 나노입자와 실리콘 기판 사이 상호작용을 나타내는 보다 실제에 가까운 모델을 적용하여 분자동력학 방법으로 구형 나노입자의 2차원적인 미끄러짐 작용과 3차원적인 롤링 작용에 의한 실리콘 표면 변화 특성 차이를 연구하였다. 이 연구는 CMP에서와 같이 압력이 작용하는 구형 나노입자와 기판 표면사이의 실질적인 물리작용을 연구하였으나, 화학적 영향이 고려되지 않았고 압력 및 이동 속도를 고려한 체계적인 연구는 수행되지 못하였다. 최근 일본의 과학자들은 Quantum Tight-binding 분자동력학 방법을 사용하여 수소화된 실리콘 표면과 실리콘 산화물 절삭용 나노입자와의 상호작용을 연구하였다[10]. 이는 실리콘 표면에 대한 실질적인 공정에 가까운 모델이었지만, 컴퓨터 계산을 고려하여 단지 100여개의 원자를 사용하여 평

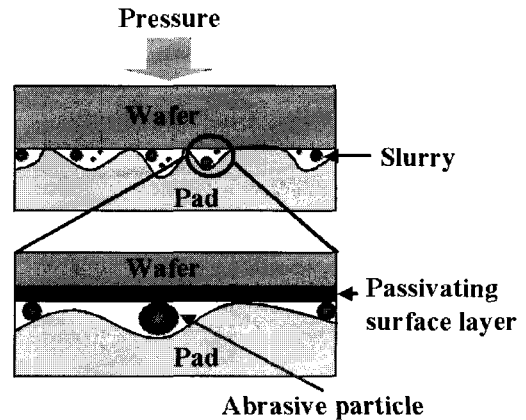


그림 1. CMP 공정에 관한 나노영역의 개략도[1].  
Fig. 1. Schematic diagram depicting nanoscale that occur during CMP[1].

평한 표면에서의 짧은 시간 동안의 반응 현상만을 연구하였다.

이와 같이 CMP 공정을 원자단위에서 연구함으로써 CMP 공정에 관한 원자단위 메커니즘을 이해할 뿐 아니라 원자단위 CMP 공정 모델링 및 시뮬레이터를 개발하는 것은 중요하다. 이러한 과정 중에서 본 연구는 원자단위에서 절삭용 구형 나노입자와 기판 상호작용을 2차원적 원자단위에서 모델링 및 시뮬레이션을 수행하였다.

## 2. 연구 방법

분자동력학 방법은 원자들 사이에 작용하는 힘에 의하여 원자들의 운동을 계산하고 각 원자들의 위치에 따른 에너지를 계산한다. 기본적인 분자동력학 알고리즘은 다음과 같다. (1) 원자들의 위치에 따라 각각의 원자의 총 에너지(V)를 계산하고, (2) 한 원자의 총 에너지(V)로부터 그 원자가 받게 되는 힘( $F = -\nabla V$ )을 계산하게 된다. (3) 계산된 힘(F)에 의하여 원자는 고전적인 뉴턴의 운동 방정식( $\vec{F} = m\vec{a} = m d^2\vec{r}/dt^2$ )에 따라서 운동을 하여 다음 단계의 위치가 결정된다. 주어진 조건에 따라서 위의 (1)-(3)의 방법을 반복하게 된다.

먼저 초기 원자위치에서 작용하는 힘(F)을 계산하고, 계산된 힘으로부터 뉴턴 방정식의 해는 Velocity Verlet 알고리즘[20]을 사용하여 원자의 다음상태 위치와 속도를 계산한다. 특정온도( $T_0$ )

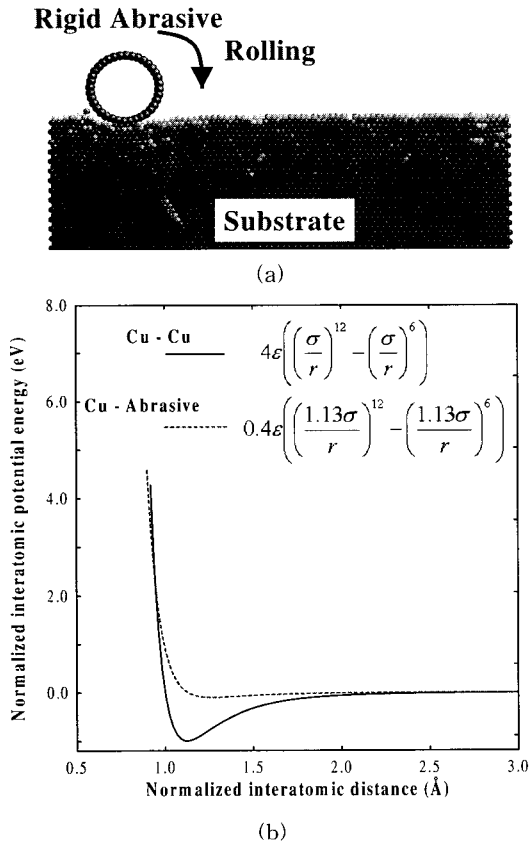


그림 2. (a) 기계적 마찰 모델을 위한 시뮬레이션 구조 (b) 구리 및 나노입자 사이의 상호작용 에너지.

Fig. 2. (a) Simulation structure for Mechanical Planarization (b) Interatomic potential energy between Cu-Cu and Cu-abrasive.

에서 분자동력학 시뮬레이션을 위해 본 연구에서는 Gunsteren-berendsen thermostat 방법을 적용한다. 초기 원자들은 맥스웰-가우시안 속도 분포를 가지게 되고, VR (velocity rescaling) 방법을 사용하여 선택된 온도로 유지시키며, 식 (1)과 같이 원자들에는 강제동력학이 적용되어 뉴턴 방정식은 수정되어진다[20].

$$M_i \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \vec{F} - \eta M_i \vec{v}_i(t) \quad (1)$$

여기서  $\eta$ 는 마찰상수로써 분자동력학 시뮬레이션

영역의 온도가  $T_0$ 가 될 때까지 감소시간  $t_T$ 에 의존하여 온도를 감소시키는 방법으로 다음과 같이 계산되어진다[20].

$$\eta = \begin{cases} \frac{1}{2t_T} \left( 1 - \frac{T_0}{T} \right), & T > T_0 \\ 0, & T \leq T_0 \end{cases} \quad (2)$$

CMP 공정에서의 기계적 마찰 반응을 모델링하기 위하여 그림 2(a)와 같은 구조를 가정하여 연구하였다.

기판은 그림 2 구조에서 얻었으며, 나노입자는 36개의 원자로 구성된 원 구조로 가정하였다. 실제 CMP 공정에서 나노입자 롤링 작용이 주요하기 때문에, 표면과의 상호작용은 롤링 작용으로 가정하였다. 기계 역학적 특성을 모델링하기 위하여 연마에는 단일 입자로 가정하여 분자동력학 시뮬레이션을 수행하였다. 기판 원자사이의 상호작용은 그림 2(b)에서와 같이  $\sigma_{Cu} = 2.277 \text{ \AA}$ ,  $\epsilon_{Cu} = 0.415 \text{ eV}$ 를 가지는 Lennard-Jones 12-6 전위식을 사용하였으며, 기판원자-나노입자 원자 사이 상호작용은  $\sigma_{Cu-abrasive} = 1.13\sigma_{Cu}$ ,  $\epsilon_{Cu-abrasive} = 0.1\epsilon_{Cu}$ 로 가정하였다. 나노입자가 0.01 Å 굴러간 후, 나노입자를 구성하는 각 원자들에 작용하는 힘을 합하여 나노입자에 작용하는 총 힘을 계산하고, 얻어진 총 힘을 사용하여 나노입자는 상하로 단일 입자 운동으로 기술되었다. 나노입자는 각 위치에서 100 fs 동안 시뮬레이션 되었으며 나노입자는 총 100 Å를 굴러갔다.

### 3. 결과 및 고찰

#### 3.1 기계적 마찰반응 모델링 및 MP 시뮬레이션

표면과 상호작용하는 나노입자에는 그림 1과 같이 압력이 작용하는 상태에서 굴러가기 때문에, 기계적 반응은 다음과 같이 세 가지 모델을 적용하였다.

- (1) Constant Force (CF) Model : 나노입자에 일정한 압력이 계속해서 작용하는 것으로 가정한 모델
- (2) Constant Depth (CD) Model : 나노입자가 일정한 높이에서 표면을 제거하는 것으로 가정한 모델
- (3) Variable Force (VF) Model : 나노입자에 작용하는 압력이 나노입자의 높이에 따라 변하는 것으로 가정한 모델

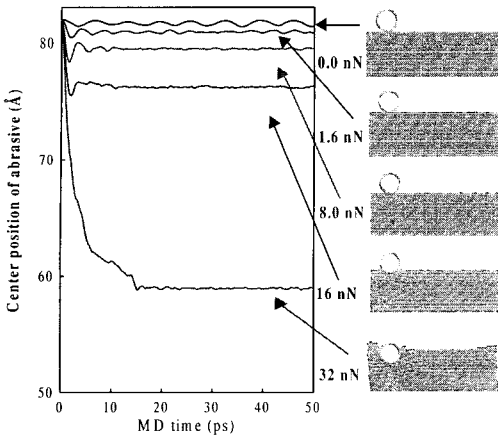


그림 3. 시간에 따라 작용하는 압력에 대한 나노입자의 깊이 변화.

Fig. 3. Center position of abrasive according to pressure as a function of MD time.

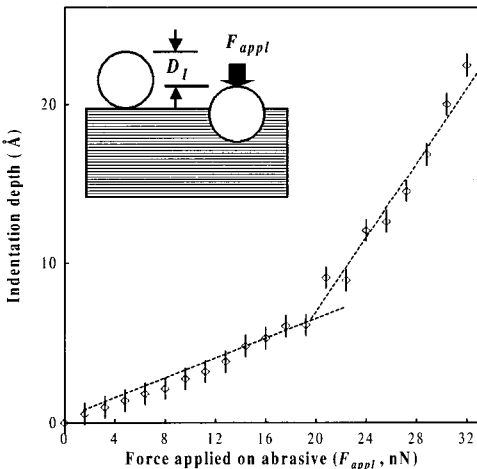


그림 4. 나노입자에 작용된 압력에 따른 삽입 깊이.

Fig. 4. Indentation depth according to force applied on abrasive.

CD 모델은 일반적으로 이전 MP 및 CMP 연구에서 널리 사용되어온 방법이다. 그러나 실제 공정에서는 나노입자에 압력이 작용하므로 CD 모델은 물리적으로 타당하지 않다. 또한 CF 모델은 기판 표면과 압축 패드에 굴곡이 있으므로 CMP 공정 동안 일정한 압력을 가정한 모델도 물리적 타당성

이 적다. 따라서 주어진 상황에 따라서 압력이 변하는 VF 모델은 물리적으로 가장 타당성 있는 모델이라 생각된다.

본 연구에서는 이들 3가지 모델을 분자동력학으로 시뮬레이션 하여 VF 모델의 타당성을 확인하였다. CMP 시뮬레이션에 앞서 그림 3과 같이 나노입자에 작용하는 압력에 따라 구리 표면에 삽입되는 깊이를 시뮬레이션 하였다. 나노입자에 수직 항력이 작용하지 않을 경우, 나노입자는 표면 위에 위치하고, 압력이 증가함에 따라서 일정한 깊이에서 안정화되는 것을 볼 수 있다. 본 연구에서는 50 ps 동안 분자동력학 시뮬레이션을 수행하여 최종적으로 안정화된 깊이를 얻었으며, 작용된 압력에 따라 나노입자가 기판에 삽입된 깊이는 그림 4와 같이 얻어졌다.

그림 3과 그림 4에서 얻어진 결과를 초기 조건으로 하여, 그때의 압력이 작용할 때 연마체가 10 m/s의 속도로 100 Å를 굴러가는 경우를 시뮬레이션 하였다. 그림 5의 오른쪽의 경우는 VF 모델을 적용하여 시뮬레이션 한 결과이다. CF 모델은 수직 작용력이 0~10 eV/Å 까지 수행되었고, VF 모델은 수직 작용력이 7~10 eV/Å 까지 수행되었다. 나노입자가 받는 수직 작용력이 8 eV/Å 이상인 경우에서 표면의 마모가 발생하는 것을 알 수 있다. 수직 작용력이 7 eV/Å 이하에서는 표면 마모 없이 나노입자가 굴러갔다. 그러나 나노입자에 작용하는 작용력이 10 eV/Å 인 경우에는 초기 조건에 따라서 결과가 매우 다르게 나타났다. 한 경우는 압력이 일정하게 작용하는 상태에서 나노입자가 굴러가기 때문에, 그림 5의 왼쪽의 그림과 같이 계속하여 기판으로 파고 들어가는 것을 볼 수 있다. 따라서 이러한 경우는 비 물리적인 상황이기 때문에, 이러한 문제를 피하기 위하여 VF 모델을 사용하였다. VF 모델은 나노입자의 깊이에 따라서 받는 압력이 변하도록 하였다. 나노입자가 기판으로 깊이 파고 들어가는 경우에는 작용하는 압력이 감소하도록 하였다. 이는 실제로 CMP 공정에서 대부분의 나노입자가 표면에서 굴러가고 기판 안쪽으로 파고 들어가지 않는 것과 일치하는 모델이다.

그림 4에서 얻어진 수직 작용력에 따른 나노입자의 초기 깊이는  $D_i$  이며 나노입자가  $D_i$  보다 더 깊이 들어감에 따라서 나노입자에 작용하는 수직 작용력은 점차적으로 감소하게 되어 DC에 이르게 되면 '0'이 되도록 하였다. 실제 CMP 공정에서 화학 반응으로 기판의 표면이 20 Å 정도의 산화보호막이 형성되기 때문에,  $D_c - D_i$  는 20 Å로 가

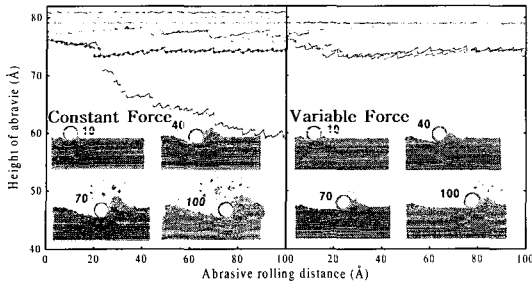


그림 5. CF 모델 (왼쪽)과 VF 모델(오른쪽) 비교. CF 모델의 선들은 위로부터 수직 작용력이 0~10 eV/Å. VF 모델의 선들은 위로부터 수직 작용력이 7~10 eV/Å 일 때 연마체의 높이 변화임.

Fig. 5. Comparison of CF model(Left) and VF model(Right). For CF model, the lines indicate the height variations of the abrasive from the top with applied normal force 0~10 eV/Å. For VF model, the lines indicate the height variations of the abrasive from the top with applied normal force 7~10 eV/Å.

정하였다. 따라서 깊이에 따른 작용력의 변화는 다음과 같이 표현된다.

$$f(d) = \begin{cases} 1 & , d \leq D_1 \\ 0.5 + 0.5 \times \cos \left[ \frac{\pi(d - D_1)}{D_c - D_1} \right] & , D_1 < d \leq D_c \\ 0 & , d > D_c \end{cases} \quad (3)$$

나노입자의 깊이(d)가  $D_1$  보다 작을 경우에는 초기 작용력이 그대로 작용하고, 나노입자의 깊이가  $D_1$ 와  $D_c$  사이에서는  $\cos$  함수에 의하여 감소하여 깊이가  $D_c$  이상에서는 작용력이 '0'이다. 이러한 VF 모델을 적용할 경우에는 그림 5의 오른쪽 그림에서 보는 바와 같이 기판을 일정 깊이로 제거하는 것을 볼 수 있다.

그림 6은 VF 모델을 위하여 깊이에 따라 나노입자에 작용하는 압력 변화이다.

그림 7은 나노입자에 작용하는 힘이 10 eV/Å인 경우, CF 모델, CD 모델, VF 모델을 적용한 경우 나노입자가 받는 마찰력, 수직항력 및 나노입자의 높이 변화 변화를 나노입자가 굴러간 거리에 따라 보여준다. 세 경우 모두 마찰력은 비슷하지만, 수직항력에서 큰 차이는 보이는 것을 알 수 있다.

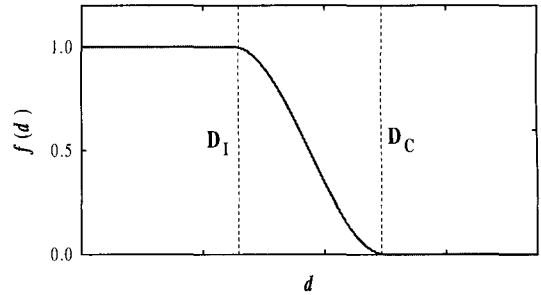


그림 6. VF 모델에서 깊이에 따른 수직 작용력의 변화.

Fig. 6. Normal force variation as a function of depth in VF model.

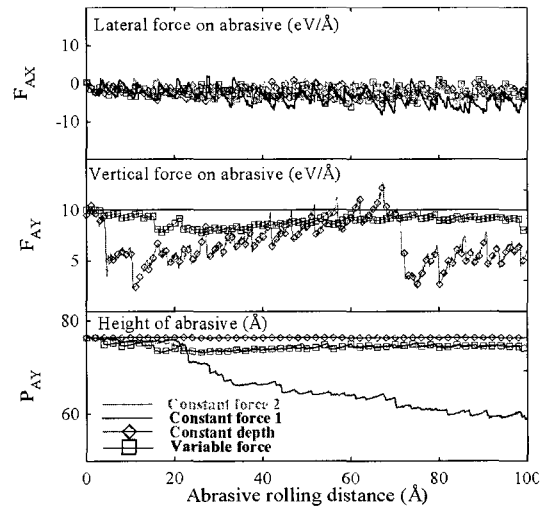


그림 7. 나노입자에 작용하는 힘이 10 eV/Å인 경우, CF 모델, CD 모델, VF 모델을 적용한 경우 나노입자가 받는 마찰력, 수직항력 및 나노입자의 높이 변화.

Fig. 7. Lateral force on abrasive, vertical force on abrasive and height of abrasive variation when the applied force is 10 eV/Å in CF model, CD model and VF model.

CD 모델의 경우에 특히 수직항력이 크게 변화하는 것을 볼 수 있다. 그림 7을 통하여 본 연구에서 제안한 VF 모델이 CMP 공정을 모델링하기에 가장 적절하다는 것을 확인할 수 있다.

그림 8은 나노입자에 작용하는 힘이 9 eV/Å 인

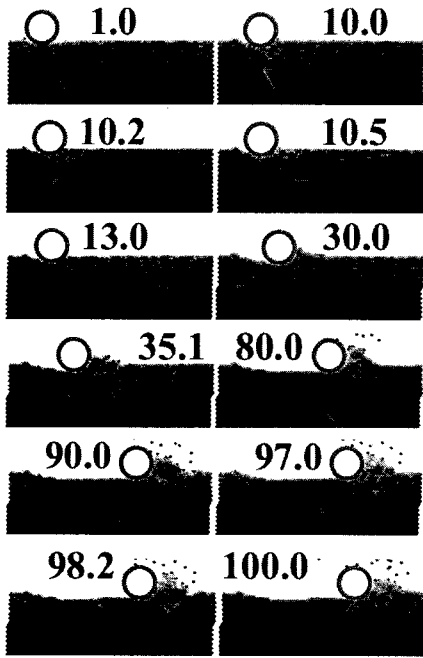


그림 8. 작용력 9 eV/Å에 Variable Force 모델을 적용한 경우 나노입자의 굴러간 거리에 따른 원자구조변화.

Fig. 8. Variation of atomic structures as a function of rolling distance of abrasive when the applied force is 9 eV/Å for Variable Force model.

경우, VF 모델을 적용하여 나노입자가 굴러간 거리에 따른 원자구조 변화를 보여준다. 나노입자가 굴러감에 따라 기판에 전위(dislocation)의 발생과 전위 이동을 관찰 할 수 있다. 나노입자가 기판에 압력을 가하기 때문에, 나노입자 아래 부분에 전위가 발생되고, 나노입자가 굴러감에 따라서 전위가 표면으로 이동하는 것을 볼 수 있다. 이와 같이 CMP 공정에서 나노입자의 삽입과 톨링현상으로 인한 기판의 전위 형성 및 이동은 중요한 현상인 것을 알 수 있다.

이와 같이 CMP 공정에서 나노입자와 기판과의 상호작용은 그림 9와 같이 요약할 수 있다. 나노입자에 압력이 거의 없을 경우 표면 마모가 일어나지 않지만, 압력이 증가함에 따라서 응축모드가 나타나서, 표면의 원자들에게 압력을 가하게 되지만 표면 마모는 일어나지 않는다. 압력이 더욱 증가할 경우 나노입자와 기판과의 흡착 반응에 의하여 표

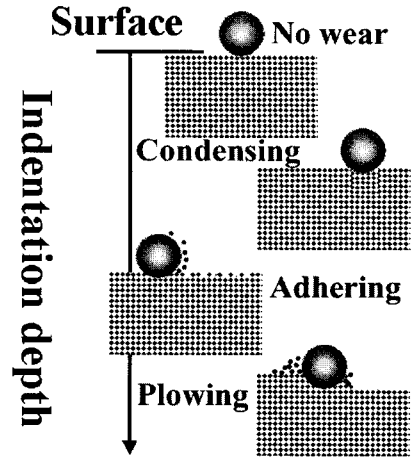


그림 9. 나노입자와 기판과의 삽입깊이에 따른 반응 개략도.

Fig. 9. Schematic diagram of abrasive and substrate according to indentation depth.

면 마모가 발생되기 시작하며, 압력이 더 크게 증가하게 되면 나노입자가 표면을 깎아낸다.

### 3.2 화학적 반응 모델을 고려한 기계적 마찰 반응 CMP 시뮬레이션

실제 CMP 공정에서는 기판 표면에서 화학 반응이 발생되기 때문에, 3.1 절에서 연구된 것과 같이 화학적 반응이 포함되지 않은 모델은 적절치 않다. 따라서 본 연구에서는 이전 Ye 등[12]이 제안한 화학 반응 모델과 본 연구에서 제안한 화학 모델들을 사용하여 분자동력학 시뮬레이션을 수행하였다. 연구된 CMP 화학 반응 모델은 다음과 같다.

- (1) Chemically Reactive Surface (CRS) Model
- (2) Chemically Passivating Surface (CPS) Model
- (3) Chemically Passivating-Reactive Surface (CPRS) Model

CRS 모델은 식 (4)와 같이 기판의 표면에 위치한 한 원자의 전위에너지( $E_i$ )가  $E_{threshold}$  보다 클 경우에 시뮬레이션에서 제거하는 방법으로, 기계적 마찰 작용에 의하여 표면에서 전위에너지가 상승하게 되면, 그 원자는 화학적 반응성이 좋아져서 CMP 공정에 사용되는 용액에 쉽게 반응하여 녹아 들어갈 수 있다는 현상에 근거하는 방법으로, Ye 등[12]이 제안하였다.

$$E_i > E_{threshold} \Rightarrow i\text{th atom REMOVAL} \quad (4)$$

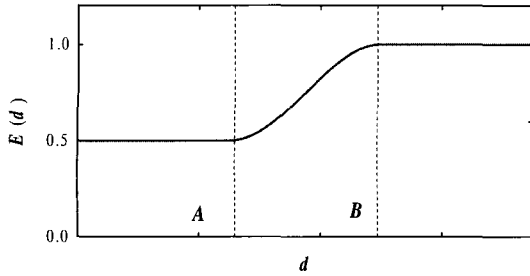


그림 10. 깊이에 따른 원자간 상호작용 결합에너지 변화.  
 Fig. 10. Interatomic energy as a function of depth.

또한 CRS 모델은 나노입자와 기판원자 사이의 흡착에너지에 의한 화학반응으로 기판 원자를 제거하는 현상을 효과적 모델링하고 있어 일부분 물리-화학적 반응성에 기초를 두고 있다. 그러나 실제 CMP 공정에서, 화학 반응은 나노입자와 반응하기 이전에 슬러리 용액과 기판 표면이 반응하여 기판 표면에 보호막을 형성한다. 그러므로 이러한 기판이 슬러리와 화학반응을 통하여 형성된 보호막을 효과적으로 모델링 할 수 있어야 한다. 따라서 본 연구에서는 CPS 모델을 제안하여 나노입자와의 기계적인 반응 이전에 화학적으로 반응한 기판 표면을 모델링하였다. 기판 표면이 슬러리 용액과의 화학 반응을 통하여 원래의 기판 보다 화학적 결합이 약하여 지기 때문에, 본 연구에서는 표면의 원자들에 대하여 원자간 상호작용 전위에너지를 감소시켜 화학반응으로 인한 결합력이 약해진 표면원자 반응을 모델링 하였다.

$$E(d) = \begin{cases} 0.5 & , d \leq A \\ 1 - \left( \frac{3}{4} + \frac{1}{4} \cos \left( \frac{\pi(d-A)}{B-A} \right) \right) + \frac{1}{2} & , A < d \leq B \\ 1 & , d > B \end{cases} \quad (5)$$

여기서 d 는 기판 표면에서부터 깊이이며, 기판 표면에서 A까지는 원자간 결합에너지가 기판 벌크에서의 절반으로 가정하였으며, B 이상에서는 원자간 결합에너지가 기판 벌크와 동일하고, A와 B 사이에서는 cos 함수에 의해서 일정하게 증가하도록 하였다. 그림 10은 식 (5)를 도식으로 표시한 것이다.

그림 11은 초기 수직 작용력이 10 eV/Å인 경우, 화학모델을 적용하지 않은 VF 모델과 화학모델들을 적용한 VF 모델에서 나노입자 롤링 거리

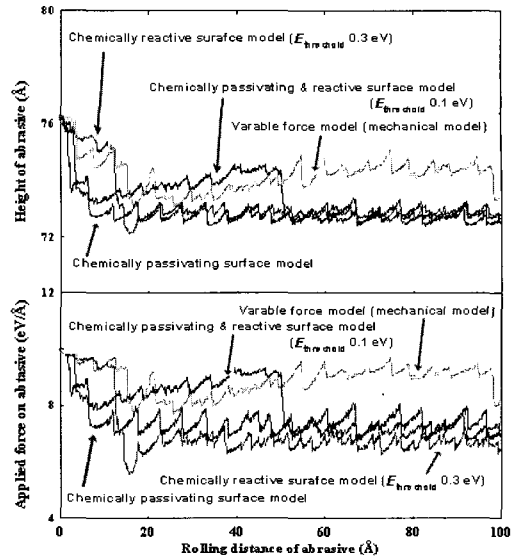


그림 11. 초기 수직 작용력 10 eV/Å인 경우, 화학반응 모델을 적용하지 않은 경우와 적용한 경우의 나노입자 높이 및 작용력 변화.  
 Fig. 11. Variation of height of abrasive and applied force on abrasive with and without chemical model when initial normal force is 10 eV/Å.

에 따른 나노입자의 높이 및 작용력 변화를 보여 준다. 화학반응 모델을 적용한 경우에는 적용하지 않은 경우보다 더 깊은 깊이에서 나노입자가 일정한 깊이로 표면을 깎는 것을 알 수 있다. 이러한 결과는 화학 반응모델을 적용하여 기판의 원자들의 마모가 화학 반응 모델을 적용하지 않은 경우보다 더 많이 일어나기 때문이다.

그림 12(5) 그림 11의 결과에서 화학 반응 모델을 적용한 경우 나노입자 롤링 작용에 의한 마모된 표면 원자 개수 변화를 보여준다. CPS 모델과 CRS 모델을 적용한 경우, 나노입자가 일정한 거리를 굴러간 후 롤링 작용이 정상상태에 도달하기 전까지는 마모된 원자 개수가 작용력에 상관없이 거의 동일하지만, 정상상태의 경우는 작용력이 증가할수록 기판 원자가 더 많이 마모되는 것을 알 수 있다. 그러나 CPRS 모델을 적용한 경우에는 나노입자가 구르기 시작하면서부터 일정한 비율로 기판 원자의 마모가 일어나는 것을 알 수 있다. 본 연구에서 제안된 CMP 공정 원자단위 시뮬레이션을 위한 화학반응 모델은 효과적으로 적용될 수 있

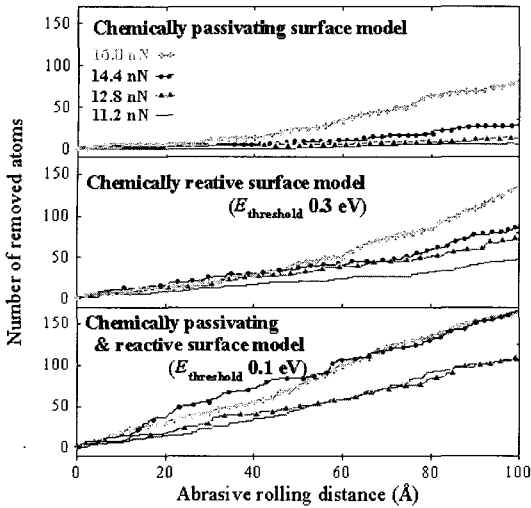


그림 12. 화학 반응 모델을 적용한 경우 나노입자 물리 작용에 의한 마모된 표면 원자 개수 변화.

Fig. 12. Variation of number of removed atoms as a function of abrasive rolling distance when chemical model is considered.

다는 것을 알 수 있다. 본 연구에서는 실제 CMP 공정에서 일어나는 정확한 결과를 얻는 것보다는, 기술적 중요성이 증대되고 있는 CMP 공정을 원자단위에서 모델링하기 위한 모델링 방법을 제시하였다. 제안한 모델들을 확장하여 실제 CMP 공정과 유사한 조건에서, 즉 더욱 정확한 원자간 전위 에너지 함수를 사용하고 제안된 모델과 관련된 식 (3)-(5)를 위한 적절한 파라미터들이 선택된다면, CMP 공정은 원자단위에서 효과적으로 시뮬레이션 될 수 있다.

#### 4. 결 론

본 연구에서는 CMP 공정의 기술적 중요성을 고려하여 CMP 공정에서 나노미터 영역에서 일어나는 나노입자와 기판사이 상호작용을 원자단위에서 모델링하고 시뮬레이션 하였다. CMP 원자단위 연구를 위하여, 다양한 모델을 제안하고 컴퓨터 시뮬레이션을 통하여 확인하였으며, 기계적인 작용을 모델링하기 위해서는 Variable Force Model이 효과적이며, 화학반응 모델에는 Chemically Passiva-

ting-reactive Surface Model이 효과적이라는 결론을 얻었다.

본 연구에서는 실제 CMP 공정이라 보다는 CMP 공정을 효율적으로 원자단위에서 모델하기 위한 다양한 모델들을 제안하고 컴퓨터 시뮬레이션 하였기 때문에, 본 연구 결과는 향후 실제 공정에 사용되어지는 물질에 대한 원자 구조 및 원자간 전위 함수들을 사용하고, 본 연구에서 제안한 모델들을 위한 적절한 파라미터들이 선택될 경우 원자단위에서 CMP 공정 모델 및 시뮬레이터로 활용될 수 있을 것으로 사료된다. 본 연구에서는 컴퓨터 시뮬레이션 속도 및 계산효율을 고려하고 CMP 공정에서 예상되는 구형 나노입자의 운동역학과 기판 상호작용 및 CMP 공정 모델링에 집중하였기 때문에, 실질적인 CMP 공정에서의 구형나노입자의 상대속도보다 빠른 상대속도가 고려되었다.

따라서 향후 연구는 실질적인 CMP 공정에서의 상대속도를 고려하고 적절한 압력이 절삭용 나노입자에 작용하는, 보다 실제적으로 공정에 사용되는 물질에 대하여 물리적 작용을 원자단위에서 모델링하여 시뮬레이션 할 것이며, 시뮬레이션을 3차원으로 확장 할 것이다.

#### 감사의 글

이 논문은 2003년도 한국학술진흥재단의 지원에 의하여 연구되었음(KRF-2003-015-C00247).

#### 참고 문헌

- [1] R. K. Singh and R. Bajaj, "Advances in chemical mechanical planarization", MRS Bulletin, Vol. 27, No. 10, p. 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, p. 752, 2002.
- [3] D. Boning and B. Lee, "Nanotopography issues in shallow trench isolation CMP", MRS Bulletin, Vol. 27, No. 10, p. 761, 2002.
- [4] R. Komanduri, N. Chandrasekarna, and L. M. Raff, "M. D. simulation of nanometric cutting of single crystal aluminum-effect of crystal orientation and direction of cutting",



- Wear, Vol. 242, No. 1-2, p. 60, 2000.
- [5] R. Komanduri, N. Chandrasekarna, and L. M. Raff, "MD simulation of exit failure in nanometric cutting", Mater. Sci. Eng. A, Vol. 311, No. 1-2, p. 1, 2001.
- [6] R. Komanduri and L. M. Raff, "A review on the molecular dynamics (MD) simulation of machining", Proc. of the I. Mech. E. (Lon) B, Vol. 215, p. 1639, 2001.
- [7] T. H. Fang, S. R. Jian, and D. S. Chuu, "Molecular dynamics analysis of effects of velocity and loading on the nano indentation", Jap. J. Appl. Phys., Vol. 41, No. 11B, p. L1328, 2002.
- [8] T. H. Fang, C. I. Weng, and J. G. Chang, "Molecular dynamics simulation of nanolithography process using atomic force microscopy", Surf. Sci., Vol. 501, No. 1-2, p. 138, 2002.
- [9] T. H. Fang and C. I. Weng, "Three-dimensional molecular dynamics analysis of processing using a pin tool on the atomic scale", Nanotechnology, Vol. 11, No. 3, p. 148, 2000.
- [10] T. Yokosuka, H. Kurokawa, S. Takami, M. Kubo, A. Miyamoto, and A. Imanura, "Development of new tight-binding molecular dynamics program to simulate chemical-mechanical polishing processes", Jap. J. Appl. Phys., Vol. 41, No. 4B, p. 2410, 2002.
- [11] D. Feichtinger, P. M. Derlet, and H. Van Swygenhoven, "Atomistic simulations of spherical indentations in nanocrystalline gold", Phys. Rev. B, Vol. 67, No. 2, p. 024113, 2003.
- [12] Y. Ye, R. Biswas, A. Bastawros, and A. Chandra, "Simulation of chemical mechanical planarization of copper with molecular dynamics", Appl. Phys. Lett., Vol. 81, No. 10, p. 1875, 2002.
- [13] Y. Ye, R. Biswas, J. R. Morris, A. Bastawros, and A. Chandra, "Molecular dynamics simulation of nanoscale machining of copper", Nanotechnology, Vol. 14, No. 3, p. 390, 2003.
- [14] J. D. Kim and C. H. Moon, "A study on microcutting for the configuration of tools using molecular dynamics", J. Mater. Proc. Tech., Vol. 59, No. 4, p. 309, 1996.
- [15] L. Zhang and H. Tanaka, "Towards a deeper understanding of wear and friction on the atomic scale—a molecular dynamics analysis", Wear, Vol. 211, No. 1, p. 44, 1997.
- [16] L. Zhang and H. Tanaka, "Atomic scale deformation in silicon monocrystals induced by two-body and three-body contact sliding", Tribology Int., Vol. 31, No. 8, p. 425, 1998.
- [17] T. Nozaki, M. Doyama, Y. Kogure, and T. Yokotsuka, "Micromachining of pure silicon by molecular dynamics", Thin Solid Films, Vol. 334, No. 1-2, p. 221, 1998.
- [18] M. Doyama, T. Nozaki, and Y. Kogure, "Cutting, compression and shear of silicon small single crystals", Nucl. Instru. Meth. Phys. B, Vol. 153, No. 1-4, p. 147, 1999.
- [19] M. Doyama, T. Nozaki, Y. Kogure, and T. Yokotsuka, "Plastic deformation of pure silicon nanocrystals by molecular dynamics", Nanostructured Mater., Vol. 12, No. 1-4, p. 333, 1999.
- [20] M. P. Allen and D. J. Tildesley, "Computer Simulation of Liquids", Oxford, Clarendon, p. 81, 1987.