

## 연마패드 압력에 따른 연마입자 이동속도 변화의 분자동역학적 시뮬레이션 연구

이규영<sup>1</sup>, 이준하<sup>2</sup>, 김태은<sup>3,a</sup>

<sup>1</sup> 강원대학교 전자정보통신공학부

<sup>2</sup> 상명대학교 컴퓨터시스템공학과

<sup>3</sup> 남서울대학교 멀티미디어학과

### Molecular Dynamics Simulations Study on Abrasive's Speed Change Under Pad Compression

Gyoo Yeong Lee<sup>1</sup>, Jun Ha Lee<sup>2</sup>, and Tae Eun Kim<sup>3,a</sup>

<sup>1</sup> School of Electronic, Information & Communication Engineering, Kangwon National University, Samcheok 245-711, Korea

<sup>2</sup> Department of Computer System Engineering, Sangmyung University, Cheonan 330-720, Korea

<sup>3</sup> Department of Multimedia, Namseoul University, Cheonan 331-707, Korea

(Received April 20, 2012; Revised June 22, 2012; Accepted June 24, 2012)

**Abstract:** We investigated the speed change of the diamond spherical abrasive during the substrate surface polishing under the pad compression by using 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. As the compressive pressure increased, the indented depth of the diamond abrasive increased and then, the speed of the diamond abrasive along the direction of the pad moving was decreased. Molecular simulation result such as the abrasive speed decreasing due to the pad pressure increasing gave important information for the chemical mechanical polishing including the mechanical removal rate with both the pad speed and the pad compressive pressure.

**Keywords:** Chemical mechanical polishing, Molecular dynamics, Semiconductor processes

#### 1. 서론

CMP (chemical mechanical polishing) 공정은 소재 및 전자산업 전반에서 활용이 증가하고 있는 공정으로, 반도체 공정에서 구리 dual 다마신 공정의 핵심으로 자리잡고 차세대 나노 구조 제작의 핵심 기술이다 [1-4]. 구리 CMP 공정은 금속막에 대한 연마 공정으

로 dual 다마신 기술이 수율에 매우 민감하게 영향을 미치고 있어 CMP 공정 기술은 초미세 반도체 공정에 있어서 핵심기술로 자리잡은 공정이다 [5-7]. 지금까지 CMP 공정기술의 발전은 대체로 실험을 통한 경험적으로 유추하는 방법으로 이루어져 왔다. 연마 마모에 대한 이해는 대체로 기계적 모델링과 단순한 시뮬레이션을 통하여 이루어지고 있는 것이 현실이다. 지금까지 CMP공정에서 연마율을 예측하기 위하여 여러 연구자들에 의해 이론적인 모델들이 제시되

어 왔다 [8-10]. Preston [8]에 의한 모델은 유리 연마를 위해 만들어졌으나 CMP모델링에도 적합하다고 알려져 있다. Tseng과 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 연마율을 구하기 위한 속도는 연마패드와 기판 사이의 상대 속도인데, 실제 기판과 작용하는 연마입자의 속도가 실제로 기판의 연마율과 직접적인 관련이 있는 것을 알 수 있다. 그러므로 연마패드의 속도는 기판과 작용하는 연마제의 이동속도와 동일할지, 아니면 차이가 나는지 연구할 필요가 있을 것이다. 특별히 연마패드에 압력이 가해지는 상황에서 연마입자의 이동속도와 압력과의 관련성은 아직까지 구체적으로 연구된 것이 없다. 따라서 본 논문에서는 단단한 연마패드에 가해지는 압력에 따른 연마입자의 이동속도의 차이를 분자동역학 시뮬레이션을 통하여 연구한다.

## 2. 실험 방법

본 연구에서 그림 1에 나타난 것과 같은 기판 원자 구조 및 연마제 원자구조를 사용하였으며, 상부의 연마패드는 기판과 동일한 구조를 가지는 강체로 가정하였다. 분자동역학 (molecular dynamics, MD) 시뮬레이션은 3차원 구조에 대해서 수행되었다. 구리 기판을 사용하였으며, 다이아몬드 구조를 가지는 구형의 연마입자를 사용하였다. 또한 구형 다이아몬드 연마입자는 구리 기판에 다양한 깊이로 삽입되어 자유롭게 운동하도록 가정하였다. 기판은 총 54,080개 구리 원자 면심입방격자 구조로 구성되었으며 다이아몬드 구형 연마입자는 총 5,882개의 원자로 구성되었고, 연마패드는 총 13,520개 구리 원자 면심입방격자 구조로 구성되었다. 시뮬레이션 수행과정에서 기판 경계에 위치한 원자들은 고정되었으며, 경계 영역의 2개의 버퍼 원자층에는 통제역학이 적용되어, 이 부분이 300 K로 일정한 온도를 유지하도록 하였다. 이는 실제 기판표면에서 연마로 인하여 발생된 에너지들이 기판 내부로 전달되기 때문에 온도상승의 효과가 기판 표면에 국부적으로 나타나지만 이 열 에너지는 기판 더 깊은 곳으로 전달되기 때문에, 이러한 현상을

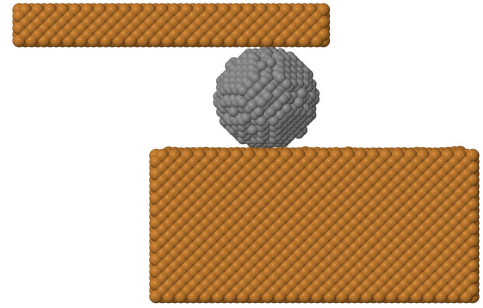


Fig. 1. Simulation structure.

모델링하기 위함이다. 연마입자의 반지름은  $20 \text{ \AA}$ 이며 기판의  $x, y, z$ 축 방향 크기는  $143, 92, 45 \text{ \AA}$ 이다. 연마입자는 분자동역학 시뮬레이션을 통하여 자유롭게 움직이도록 하였다.

구리 기판에 사용한 전위함수와 구리-탄소 상호작용에 사용한 전위함수는 Morse 전위에너지 함수이다. 구리-구리 상호작용을 위한 Morse 전위에너지 함수의 변수  $a$ 는 1.3588,  $D_e$ 는 0.3429,  $r_e$ 는 2.866을 사용하였다 [11]. C-Cu 상호작용을 위한 Morse 전위에너지 함수의 변수  $a$ 는 1.7,  $D_e$ 는 0.1,  $r_e$ 는 2.2을 사용하였다. 연마입자는 Tersoff potential을 이용하여 시뮬레이션하였다. 운동방정식을 위하여 Velocity-Verlet 알고리즘을 사용하였다. Velocity-Verlet에 사용된 시간 간격은 0.5 fs이다. 연마 패드와 기판 사이의 상대속도는 62.5 m/s를 사용하였다.

그림 1은 연마과정을 연구하기 위한 분자동역학 시뮬레이션의 원자단위 구조이다. 강체로 가정된 상판의 연마패드는 원자단위 시뮬레이션을 수행하지 않고 일정한 상대속도로 이동하면서 연마입자와 상호작용되도록 하였다. 단단한 패드에 의한 연마입자의 움직임은 알기 위하여 단단한 패드와 연마입자 그리고 연마입자와 Cu 기판과의 상호작용에 사용되는 Morse potential을 이용하여 시뮬레이션 과정 동안에 패드의 작용을 하도록 하였다. 연마 압력에 따른 연마입자의 움직임을 알기 위하여 연마패드의 압력을 서로 다르게 하여 비교 실험하였다. 비교 대상은 연마 입자의 움직인 거리이다. Preston 방정식에 따르면 연마율은 압력과 속도의 곱에 비례한다. 여기서 속도는 연마패드와 웨이퍼 간의 상대 속도이다. 즉 연마율의 예상 값은 상대속도가 변하지 않는다면 연마입자의 움직임 속도도 변하지 않는 것으로 예측되지만, 본 연구에서는 이러한 속도에 차이가 나타나게 되는 것을 살펴볼 것이다.

### 3. 결과 및 고찰

그림 2는 동일한 거리를 움직인 연마 패드의 압력의 변화에 따른 연마입자의 위치의 변화를 보여준다. 상단은 연마입자가 연마 압력이 가장 작을 때이고 하단으로 갈수록 연마입자가 연마패드의 압력이 높아지는 경우에 대한 시뮬레이션 결과에 대한 그림이다. 연마패드와 Cu 기판의 상대속도가 서로 같음에도 불구하고 연마 압력이 가장 높았을 경우에는 연마입자가 가장 적게 이동한 것을 볼 수 있다. 이는 연마 압력이 커질수록 연마입자가 기판 표면을 뚫고 들어가기 시작하면서 연마입자에 대한 x축 방향 (즉 패드 이동방향)의 저항력이 증가하였기 때문이다. 이 경우 연마패드가 연마입자에 전달할 수 있는 x축 방향으로의 힘이 제한적이기 때문에 연마 패드와 연마입자 사이에 미끄러짐이 생기면서 연마 입자의 x축 방향으로의 움직임을 방해하는 현상이 나타나기도 하기 때문이다. 따라서 연마입자의 움직임 속도는 기판과 연마패드 사이의 상대속도에 의해서만 결정되는 것이 아니라 연마입자에 가해지는 압력과 연마패드에서 연마입자에 전달해 줄 수 있는 x축 방향으로의 작용력에 의해서도 결정됨을 알 수 있다.

연마입자의 움직임에 대하여 좀 더 자세히 살펴보기 위하여 그림 3에서 연마 깊이에 따라 연마입자의 시간에 따른 이동거리의 변화를 보여주고 있다. 그래프는 시간에 따른 이동거리가 달라지는 것을 나타낸다. 진행 방향으로 속도가 달라지는 것은 slide-to-roll ratio가 달라지고 있음을 의미하는 것으로, slide-to-roll ratio가 1이 될 때 입자의 움직인 거리가 가장 커지고 slide-to-roll ratio가 0이 될 때 입자의 움직인 거리가 가장 작아지게 되는데, 그림 3에서는 깊이가 4 Å인 경우에 연마 입자의 제자리 구름현상도 일어났다는 것을 볼 수 있다. 그림 4는 그림 3의 데이터를 이용하여 연마입자의 평균속도를 연마입자의 깊이의 함수로 보여주고 있다. 연마입자가 기판에 깊이 삽입되면 될수록 평균속도가 감소하는 것을 알 수 있다. 이전연구 [12]에서 slide-to-roll ratio값이 0인 경우 가장 연마된 깊이가 낮고 slide-to-roll ratio값이 커질수록 연마된 깊이도 커졌다. 이는 slide-to-roll ratio값에 따라 깊이방향으로 받는 힘의 차이가 나타나는 것으로 slide-to-roll ratio값이 작을수록 깊이방향으로 받는 힘이 큰 것을 의미한다. 이는 또한 깊이방향으로 더 많은 압축이 일어났다는 것을 의미하는 것으로, 압축되었던 것이 연마입자가 x축 방향으로 진행해 감에

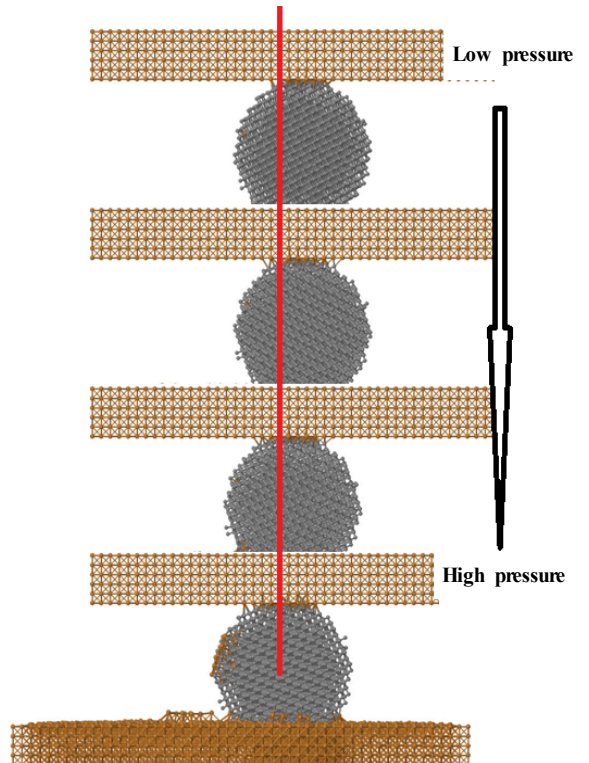


Fig. 2. Simulation results for different compression.

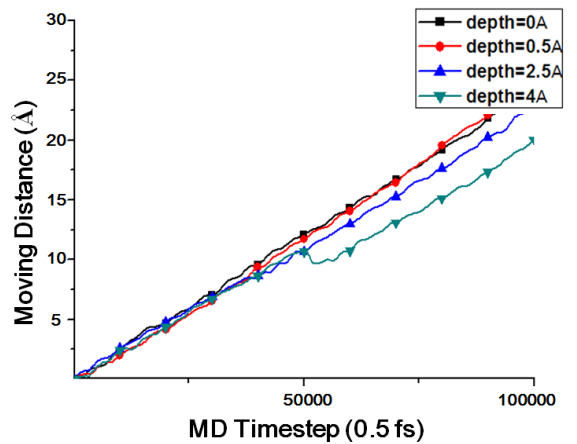


Fig. 3. Moving distances as a function of the MD time for different depth.

따라 복원되어 가면서 다시 제자리를 찾아 가는 입자가 더 많다는 것을 가리키는 것이다. 즉 실제 연마되는 깊이는 같은 깊이로 연마 입자가 진행하더라도 slide-to-roll ratio값이 클수록 더 커다는 것이다 [12].

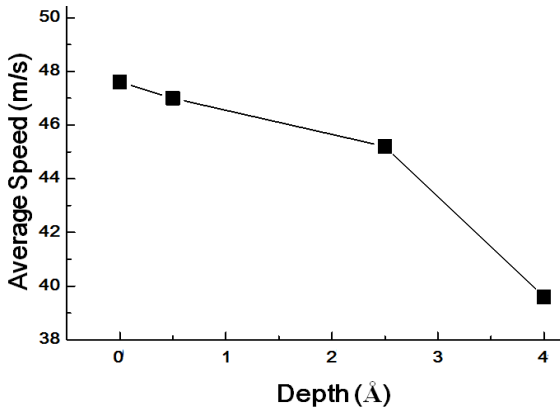


Fig. 4. Average speed of the abrasive as a function of the depth.

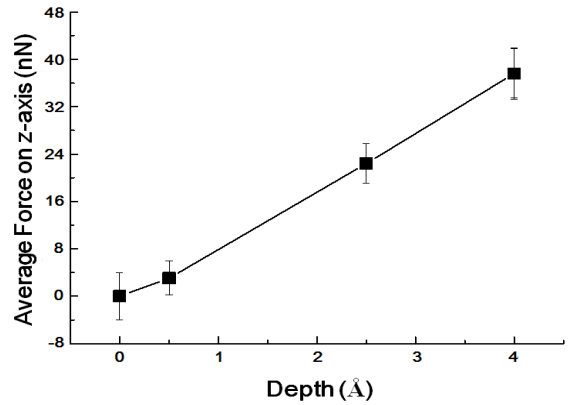


Fig. 6. Average force on z-axis as a function of the depth.

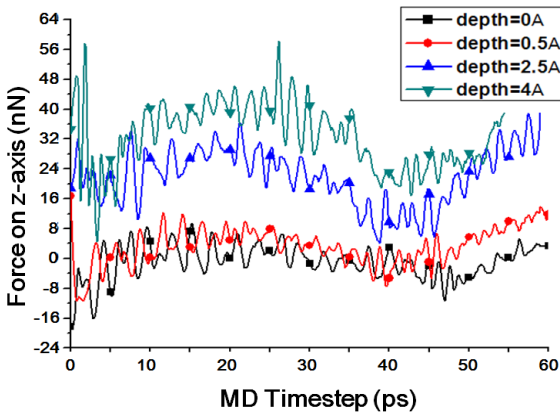


Fig. 5. Force on z-axis as a function of the MD time for different depth.

그림 5는 연마입자의 기관 삽입 깊이에 따라서 시간의 함수로 수직방향 힘의 변화를 보여주고 있다. 시간이 지남에 따라서 수직방향으로 작용하는 힘은 대략적으로 일정한 폭 안에서 진동하고 있는 것을 볼 수 있다. 이러한 진동은 slide-to-roll ratio의 변화와 밀접히 관련되어 있다. 특별히 연마입자의 삽입 깊이가 증가할수록 수직방향으로 작용하는 힘은 증가하는 것을 볼 수 있는데, 그림 6은 연마입자 기관 삽입 깊이에 따른 평균적인 수직방향 작용력의 변화를 보여주고 있다. 삽입 깊이가 증가함에 따라서 작용력은 거의 선형적으로 증가하는 것을 확인할 수 있다. 이러한 삽입 깊이의 변화는 마찰계수의 변화와 밀접한 관계가 있다 [13]. Slide-to-roll ratio값이 증가할수록

연마 깊이는 증가하는데, 이때 마찰계수도 증가하는 경향을 보였다 [13]. CMP 실험에서 얻어지는 마찰계수 값과 분자 동역학 시뮬레이션에서 얻어지는 값과 비교하면 slide-to-roll ratio값이 0.2 이하가 될 것으로 예측되었었다 [13].

본 연구에서는 연마패드를 강체로 고려하여 연구하였으나, 실제로는 강체가 아니기 때문에 본 연구의 결과를 직접적으로 실험적인 결과와 비교할 수 없는 단점을 갖고 있다는 것은 분명하다. 그러나 연마입자의 운동이 상부의 연마패드와 밀접하게 관련되어 있기 때문에 향후 강체가 하는 것으로 가정된 시뮬레이션 연구가 수행되면 실질적으로 의미있는 결과들을 얻을 수 있을 것으로 판단된다. 또한 본 연구에서 사용된 직경 4 nm 연마입자 실제 연마입자보다 작은 것이었다. 연마입자가 커지더라도 기본적인 경향성을 유사할 것으로 예상되지만 slide-to-roll ratio값에 따른 연마입자의 삽입 깊이와 마찰계수 값 등은 변화할 것으로 예상된다. 따라서 향후 이와 관련하여 실험 스케일에서 시뮬레이션 연구가 수행될 경우, 더욱 의미 있는 과학적 기술적 정보를 얻게될 것으로 기대된다.

#### 4. 결론

본 논문에서는 연마 패드 아래의 다이아몬드 구형 연마입자와 구리 기관 사이에서 연마 패드에 가해지는 압력이 변화할 때 연마입자의 이동속도의 변화에 관하여 분자 동역학 시뮬레이션을 이용하여 연구하였다.

분자동역학 시뮬레이션은 Morse 전위에너지 함수와 Tersoff 전위식 함수를 사용하여서, 연마패드가 일정 속도로 움직일 때에 연마패드에 작용하는 압력이 증가함에 따라서 연마입자의 이동속도가 느려지는 현상에 관하여 살펴보았다. 압력이 증가함에 따라서 연마입자가 기판에 삽입되는 깊이가 증가함으로 인하여 높은 압력에서 연마입자가 제자리 구름 현상이 일어날 가능성이 증가함과 동시에, 연마입자가 수평방향으로 이동하기에 요구되는 작용력이 감소하는 결과를 초래하였기 때문이다. 이러한 결과를 마찰계수에도 영향을 미치게 된다. 이러한 결과는 지금까지 Preston 방정식에 의하여 단순하게 연마패드의 압력과 속도에 비례하여 연마율을 구하여 왔던 것과는 다르게 압력의 증가로 인하여 연마입자의 이동속도의 감소가 발생하는 현상을 고려하는 발전된 연마율 방정식이 필요할 것으로 사료되는 연구결과를 얻었다. 이번 연구 결과는 향후 실험 조건과 일치하는 조건에서 원자 구조 및 원자 간 전위 함수 등을 고려함으로써 실제 실험에서 일어나는 현상에 대한 기초 학문적 정보를 제공할 수 있을 것으로 기대된다.

### 감사의 글

이 논문은 2007년도 남서울대학교 학술연구비지원에 의해 연구되었음.

### REFERENCES

- [1] K. Singh and R. Bajaj, *MRS Bulletin*, **27**, 743 (2002).
- [2] K. Singh, S. M. Lee, K. S. Choi, G. B. Basim, W. Choi, Z. Chen, and B. M. Moudgil, *MRS Bulletin*, **27**, 752 (2002).
- [3] Bajaj, A. Zutshi, R. Surana, M. Naik, and T. Pan, *MRS Bulletin*, **27**, 776 (2002).
- [4] Evans, *MRS Bulletin*, **27**, 779 (2002).
- [5] K. J. Lee, S. Y. Kim, and Y. J. Seo, *J. KIEEME*, **15**, 939 (2002).
- [6] C. B. Kim, S. Y. Kim, and Y. J. Seo, *J. KIEEME*, **15**, 832 (2002).
- [7] C. J. Park, S. Y. Kim, and Y. J. Seo, *J. KIEEME*, **15**, 39 (2002).
- [8] F. Preston, *J. Soc. Glass Technol.*, **11**, 214 (1927).
- [9] W. T. Tseng and Y. L. Wang, *J. Electrochem. Soc.*, **144**, L15 (1997).
- [10] F. G. Shi and B. Zhao, *Appl. Phys.* **A67**, 249 (1998).
- [11] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford University Press, 1987) p. 71.
- [12] J. W. Kang and Y. G. Choi, *J. Semicond. Display Tech.*, **10**, 49 (2011).
- [13] B. H. Park and J. W. Kang, *J. Semicond. Display Tech.*, **10**, 47 (2011).