

절삭용 구형나노입자와 기판 상호작용에 관한 원자단위 모델링

Atomistic Modeling of Spherical Nano Abrasive-Substrate Interaction

강정원, 송기오, 최원영, 변기량, 이재경, 황호정*

(J. W. Kang, K. O. Song, W. Y. Shoi, K. R. Byun, J. K. Lee, and H. J. Hwang)

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. The abrasive dynamics was modeled by three cases, such as slipping, rolling, and rotating. Simulation results showed that the different dynamics of the abrasive results the different features of surfaces. This model can be extended to investigate the 3-dimensional chemical mechanical polishing processes.

Key Words : Atomistic Modeling, Molecular Dynamics, Mechanical Polishing, Abrasive

1. 서론

나노입자와 기판 표면사이의 상호작용을 기초로 하는 CMP (Chemical Mechanical Polishing) 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 자리잡고 있는 실정이다[1-7]. 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 장애요인이 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 반

응연구가 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 어려운 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 cutter 등을 이용하여 실리콘 및 금속 표면에 나노 영역 흡집 내기 또는 절단에 관한 것이다. 일정 압력하에서 고정된 물체에 의한 기판 표면 마모 및 평탄화에 관한 것에 기초하여 수행되었다[8-23]. 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 이동성있는 구형 나노입자와 기판 상호작용에 관한 모델로써 연구가 반드시 수행되어야

* : 중앙대학교 전자전기공학부
(서울시 동작구 흑석동 221번지)
Fax: 02 812-5318
Corresponding Author : hjhwang@cau.ac.kr
2003년 5월 7일 접수, 2003년 5월 28일 1차 심사완료,
2003년 6월 24일 최종 심사완료

만 한다. 지금까지 연구된 대부분의 모델은 기계적 표면 평탄화인 MP (Mechanical Planarization)에 관한 연구에 집중되어져 왔으며, 최근에서야 CMP에 관한 연구가 시작되었다[14,16]. 1980년대 후반 이후 미국 Lawrence Livermore National Laboratory의 연구자들은 나노영역의 다이아몬드 cutter에 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 8-10 과 17에 요약 정리되어 있다. 그러나 이러한 연구들은 실제 CMP에서 사용되는 구형 나노입자의 다양한 운동 양식에 따른 특성에 관한 연구가 아니라 나노영역에서 나노 cutter에 의한 표면 구조 변화에 대하여 집중되어있다.

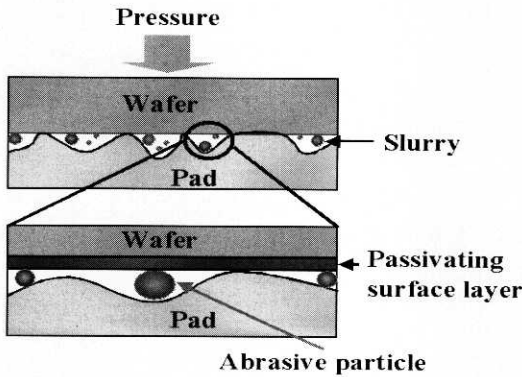


그림 1. CMP 공정에 관한 나노영역의 개략도.
Fig. 1. Nanometric schematic of CMP process.

최근 구형 나노입자와 기판 사이의 상호작용에 관한 원자단위연구가 수행되었다[15]. 이전의 고정된 팁모양의 인덴터 (indenter) 나 cutter 대신 이들은 구형의 인덴터를 사용하여 연구하였으나 일정 압력이 작용하는 구형 나노입자의 이동성에 따른 표면 변화 특성에 관한 연구는 수행되지 않았다. Zhang 과 Tanaka[20]는 다이아몬드 구형 나노입자와 실리콘 기판 사이 상호작용을 나타내는 보다 실제에 가까운 모델을 적용하여 분자동력학 방법으로 구형 나노입자의 2차원적인 미끄러짐 (Slipping) 작용과 3차원적인 구름 (Rolling) 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 속도 등을 고려한 체계적인 연구는 수행되지 못하였다. 최근 일본의 과학자들은 Quantum Tight-Binding 분자동력학 방법을 사용하여 수소화된 실리콘 표면과 실리콘 산화물 절삭용 나노입자와의 상호작용을 연구하였다[14]. 이는 실리콘 표면에 대한 실질적인 공정에 가까운 모델이었지만, 컴퓨터 계산을 고려하여 단지 100여개의 원자를 사용하여 평평한 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. 2장에서는 연구 방법 및 모델링을 소개하고, 3장에서는 시뮬레이션 결과를 보여주며, 마지막으로 4장에서는 결론 및 본 논문에 이어서 연속적으로 수행될 향후 연구 방향을 제시한다.

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(Newton equation: $\vec{F} = m\vec{a} = m d^2\vec{r} / dt^2$)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[24]을 사용하여 원자의 다음상태 위치와 속도를 계산한다. 특정온도(T_0)에서 분자동력학 시뮬레이션을 위해 본 연구에서는 Gunsteren-Berendsen thermostat 방법을 적용한다. 초기 원자들은 Maxwell-Gaussian 속도 분포를 가지게 되고, VR (velocity rescaling) 방법을 사용하여 선택된 온도로 유지시키며, 식 (1)과 같이 원자들에는 강제동력학(constraint

dynamics)이 적용되어 뉴턴 방정식은 수정되어진다[24].

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

여기서 η 는 마찰상수(friction coefficient)로서 분자동역학 시뮬레이션 영역의 온도가 T_0 가 될 때까지 감소시간 t_T 에 의존하여 온도를 감소시키는 방법으로 다음과 같이 계산되어진다[24].

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

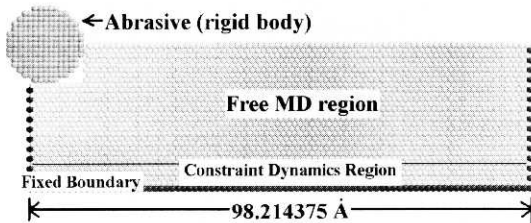


그림 2. 분자동역학 시뮬레이션을 위한 구조.
Fig. 2. Structure for MD simulations.

분자동역학 시뮬레이션을 사용하여 구형 나노 절삭용 입자와 기판 사이 상호작용에 관하여 연구하기 위하여 그림 2와 같은 2차원 구조를 사용한다. 나노영역에서 절삭용 나노입자의 운동은 직선 운동으로 근사화 될 수 있으며 분자동역학의 계산량을 고려하여 2차원 구조 모델에서 시뮬레이션을 수행하였다. 원에 가까운 나노 절삭용 입자는 기판과 비교하여 매우 단단하다고 가정하여 나노 절삭용 입자를 구성하는 원자들은 분자동역학 방법을 적용하지 않았다. 나노 절삭용 입자는 기판바닥으로부터 일정한 높이에 있도록 가정하였다. 기판 구조의 바닥과 옆면의 모서리 원자들은 시뮬레이션 동안 고정되었으며, 바닥으로부터 4개의 원자층에는 일정한 온도유지를 위하여 강제동역학이 적용되었다. 본 연구는 실질적인 물질에 대한 연구가 아닌 그림 3에서 보는 바와 같이 구형 나노입자와 표면 사이 상호작용을 연구하기 위함이며 CMP 공정 모델링 및 시뮬레이터 개발에 관한 연구이기 때문에, 가장 일반적인 원자간 전위에너지 함수를

사용하였다. 원자간 상호작용은 Lennard-Jones 12-6 모델[24]을 사용하여 파라미터들은 $\sigma = 1 \text{ \AA}$, $\epsilon = 1 \text{ eV}$ 로 하였다. 그림 2에서 보여진 구조는 이들 파라미터들을 사용한 Lennard-Jones 12-6 모델에 최적인 구조이다. 본 연구에서 원자 질량은 1 amu로 가정하였으며 T_0 는 원자들의 평균 속력이 10 Å/ps가 되도록 선택되었다.

본 연구에서는 나노 절삭용 입자와 기판사이의 상호작용은 그림 3에서와 같이 나노 절삭용 입자의 각속도 w_a 와 이동 속도 v_a 를 고려하여 나노 절삭용 입자의 반경이 r 일 경우 세 가지 운동을 가정하였다. ① 나노 절삭용 입자의 회전없이 미끄러짐 (Slipping) ② 나노 절삭용 입자의 구름 (Rolling) ③ 나노 절삭용 입자의 이동없이 제자리에서 회전하는 경우 (Rotating). ①과 ②의 경우에 대하여 속도(v_a)이 125.6 과 12.56 m/s 인 두 가지 조건에 대하여 시뮬레이션 하였으며, ③의 경우에는 ②의 경우에서 속력이 125.6 m/s에 해당되는 경우의 각속도(w_a)에 대하여 시뮬레이션 하였다.

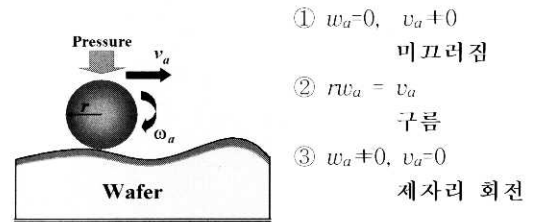


그림 3. 기판위의 구형 나노입자 운동.
Fig. 3. Moving of nano abrasive on substrate.

3. 결과 및 고찰

그림 4(a)와 4(b)는 속도 $v_a = 125.6 \text{ m/s}$ 인 경우의 ①과 ② 조건에 대한 분자동역학 시뮬레이션 결과로, 초기 위치에서 나노 절삭용 입자가 62.8 Å 이동하였을 때의 C/E(Configuration/Energy) 도면이다. C/E 도면은 각 원자에 미치는 압력의 상대적인 비교를 보여준다. 나노 절삭용 입자의 미끄러짐(Slipping) 현상에 의하여 기판에는 쟁기질(Plowing) 및 절단(Cutting) 작용과 같은 결과가 일어났다. 기판에 미치는 압력의 방향은 나노입자 이동방향과 그 이동방향에 60° 방향이었다. 60° 방향으로의 압력은 본 연구에서 사용된 기판의 원자 구조배열에 기인한 것으로, 기판의 구조가 다른 경

우에는 달라질 수 있지만, 이동 방향을 따라 나노 절삭용 입자 전방으로 주요한 압력이 작용한다. 그러나 나노 절삭용 입자의 구름(Rolling) 현상에 의해서는 미끄러짐 현상에 의한 결과와는 매우 다른 결과를 보여주었다. 나노 절삭용 입자의 구름 현상으로 기관에는 응축(Condensing), 흡착(Adhering) 및 쟁기질(Plowing) 작용 등이 일어났다. 기관에 미치는 압력은 나노입자 이동 방향과 그 이동방향에 대한 60° 방향 뿐 아니라 기관 전체이며, 나노 절삭용 입자를 중심으로 180° 영역 내에 나타났다. 나노 절삭용 입자가 회전하기 때문에, 나노 절삭용 입자 아래 부분의 기관 원자들은 마찰력에 의하여 나노 절삭용 입자 진행방향에 반대 방향으로 힘을 받게 되고, 그 결과 나노 절삭용 입자 이동 방향 뒤쪽으로 기관 원자들이 밀려나와 쌓이는 것도 볼 수 있다.

그림 5(a)와 5(b)는 속력 $v_a = 12.56$ m/s인 경우의 ①과 ② 조건에 대한 분자동력학 시뮬레이션 결과로 초기 위치에서 나노 절삭용 입자가 62.8 Å 이동하였을 때의 C/E 도면이다. 그림 4의 경우와 같이 나노 절삭용 입자의 미끄러짐 현상에 의하여 기관에는 쟁기질 및 절단 작용과 같은 결과가 일어났다. 나노 절삭용 입자의 구름 현상에 의해서는 기관에는 응축, 흡착 및 쟁기질 작용 등의 결과가 일어났다. 기관에 미치는 압력은 이동 방향과 이동 방향에 대한 60° 방향 뿐 아니라 기관 전체에서 나노 절삭용 입자를 중심으로 180° 영역내에 나타났지만, 그림 4(b)에서보다 10배 느린 속도이기 때문에, 나노입자 이동방향 후방을 향하는 마찰력의 크기는 적고, 그 결과 나노 절삭용 입자 이동 방향 뒤쪽으로 기관 원자들이 밀려나와 쌓이는 것은 적다. 그림 4와 5는 나노 절삭용 입자 운동 방식에 따른 기관과의 상호작용에서의 차이를 보여주었다. 나노 절삭용 입자의 구름 현상에서 기관 원자들이 나노 절삭용 입자로부터 받는 힘에 의하여 나노 절삭용 입자와 기관 접촉부분에서 기관에는 응축 현상이 일어나며, 나노 절삭용 입자가 회전하게 될 때 기관의 응축된 영역에서는 나노 절삭용 입자 운동방향과 반대 방향으로 마찰력을 받아서 나노 절삭용 입자에 흡착된 기관 원자들은 나노 절삭용 입자 뒤쪽으로 쌓인다. 마찰계수가 클수록 이러한 미끄러짐 현상과 구름 현상의 차이는 뚜렷하게 될 것이다. 이동 속도가 작은 그림 5 경우는 이동 속도가 10배 빠른 그림 4 경우보다 기관의 표면이 더 편편하였으며 기관은 더 적은 압력을 받는 것을 알 수 있다. 나노 절삭용 입자의 미끄러짐 현상에서는 이동 속도와는 거의 무관하게 기계적인 마

찰에 의하여 제거되는 기관 원자수는 비슷한 반면에, 구름 작용에 의해서는 이동속도가 적을수록 더 많은 기관 원자들이 제거되었다. 이는 본 연구에서 비교된 속도들에서, 큰 속도의 경우에는 나노 절삭용 입자와 기관사이의 마찰 작용에 의하여 나노 절삭용 입자의 반대방향으로 쌓이는 기관 원자들이 더 많기 때문이다. 화학 반응을 고려한 경우에는 결과가 달라질 수 있으며, 향후 연구들에서 연구될 것이다.

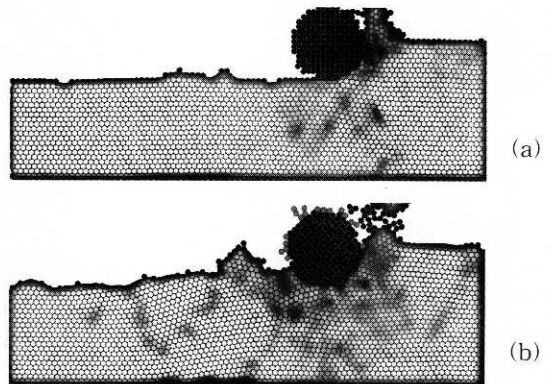


그림 4. $v_a = 125.6$ m/s인 경우의 (a) 미끄러짐과 (b) 구름 조건에 대한 분자동력학 시뮬레이션 결과의 C/E 도면.

Fig. 4. In $v_a = 125.6$ m/s, C/E plots for (a) slipping and (b) rolling conditions.

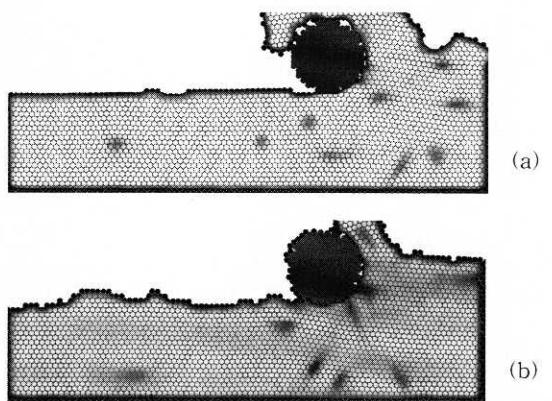


그림 5. $v_a = 12.56$ m/s인 경우의 (a) 미끄러짐과 (b) 구름 조건에 대한 분자동력학 시뮬레이션 결과의 C/E 도면.

Fig. 5. In $v_a = 12.56$ m/s, C/E plots for (a) slipping and (b) rolling conditions.

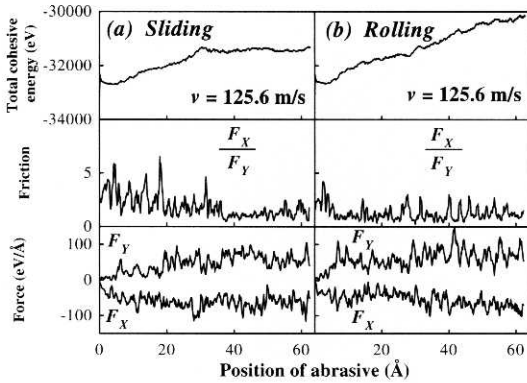


그림 6. $v_a = 125.6$ m/s인 경우의 (a) 미끄러짐과 (b) 구름 조건에 총 원자 내부에너지, 마찰계수.

Fig. 6. In $v_a = 125.6$ m/s, total cohesive energy and friction coefficient for (a) slipping and (b) rolling conditions.

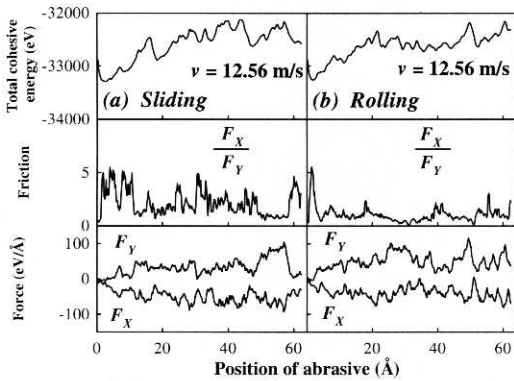


그림 7. $v_a = 12.56$ m/s인 경우의 (a) 미끄러짐과 (b) 구름 조건에 총 원자 내부에너지, 마찰계수.

Fig. 7. In $v_a = 12.56$ m/s, total cohesive energy and friction coefficient for (a) slipping and (b) rolling conditions.

그림 6은 $v_a = 125.6$ m/s 경우에 대한 나노 절삭용 입자의 이동 위치에 따른 기관의 총 원자 내부 에너지, 나노 절삭용 입자에 작용하는 진행방향 힘 (F_x)과 기관 수직 방향 힘(F_y)의 변화 및 마찰상수 (Friction coefficient)의 변화를 보여준다. 미끄러짐 작용의 경우 이동 거리 30 Å 정도부터 기관 총 원자 내부에너지는 일정하게 유지되고 마찰상수도 일정하게 유지되는 것을 알 수 있다. 구름 작

용의 경우에 기관 총 원자 내부에너지는 이동 거리에 따라서 거의 일정한 비율로 증가하는 것을 보이며, 마찰상수도 이동 거리에 따라서 큰 차이 없이 일정 영역 내에서 유지되는 것을 볼 수 있다. 그림 7은 $v_a = 12.56$ m/s 경우에 대한 나노 절삭용 입자의 이동 위치에 따른 기관의 총 원자 내부 에너지, 나노 절삭용 입자에 미치는 F_x 와 F_y 의 변화 및 마찰상수(Friction coefficient)의 변화를 보여준다. 미끄러짐 작용의 경우 이동 거리 30 Å 정도부터 기관 총 원자 내부에너지는 일정 범위 내에서 유지되고 마찰상수도 일정 범위 내에서 유지되는 것을 볼 수 있다. 구름 작용의 경우에는 기관 총 원자 에너지는 이동 거리 20 Å 이상에서 거의 일정하게 유지되는 것을 볼 수 있으며, 마찰상수도 이동 거리에 따라서 큰 차이 없이 일정 영역 내에서 유지되는 것을 볼 수 있다. 그림 6과 7에서, 구름 현상에서의 마찰계수값은 미끄러짐 현상에서 마찰계수보다 낮은 것을 알 수 있으며, 이는 마찰 역학이론과 일치하는 결과이다.

그림 8(a)은 $v_a = 125.6$ m/s인 경우 구름 작용으로 나노 절삭용 입자가 40 Å 이동한 위치에서 원자구조이다. 그림 8(b)는 그림 8(a)에서 나노 절삭용 입자가 중심이 고정된 상태로 360° 제자리 회전 (Rotating) 작용을 한 결과를 보여준다. 제자리 회전 작용으로 나노 절삭용 입자 아래쪽으로 작용하는 힘에 의하여 기관 표면은 응축이 되며, 기관과의 마찰 작용에 의하여 기관 원자들은 나노 절삭용 입자에 흡착된다. 흡착된 기관 원자들은 나노 절삭용 입자와 함께 회전하고 흡착된 원자들은 원래의 나노 절삭용 입자의 진행방향의 앞쪽에 쌓이는 것을 볼 수 있다. 이 같은 현상은 본 원자단위 모델이 모든 원자 상호 작용을 Lennard-Jones 12-6 전위식으로 모델링하였기 때문이다. 만약 다른 전위식을 사용하여 흡착 반응이 나타나지 않는다면, 기관 원자들은 마찰 작용에 의하여 깎여 나가게 될 것이다. 나노 절삭용 입자의 제자리 회전 작용 이후 기관에 작용하는 압력은 원래 나노 절삭용 입자의 진행 방향의 반대쪽으로 반원 모양의 방사형인 것을 그림 8(b)에서 알 수 있다.

그림 9는 그림 8에 대하여 나노 절삭용 입자의 회전 각도에 따른 기관의 총 원자 내부에너지, 나노 절삭용 입자에 작용하는 F_x 와 F_y , 그리고 마찰계수를 보여준다. 나노 절삭용 나노입자의 제자리 회전 작용에 의하여 기관 총 원자 내부에너지는 점점 감소하는 것을 볼 수 있으며, 이는 기관이 점차 안정화되는 것을 의미한다. 회전이 진행됨에 따라서 나노 절삭용 입자가 원래 이동 방향으로부터

받는 힘은 약간씩 감소하여 거의 일정한 값으로 수렴되며, 기관에 수직인 힘 또한 점점 감소하여 0에 가까워지는 것을 볼 수 있다. 이는 회전이 진행됨에 따라서 나노 절삭용 입자 아래쪽의 기관 원자들이 제거되어 나노 절삭용 입자와 기관 사이의 마찰력이 점점 감소하기 때문이다.

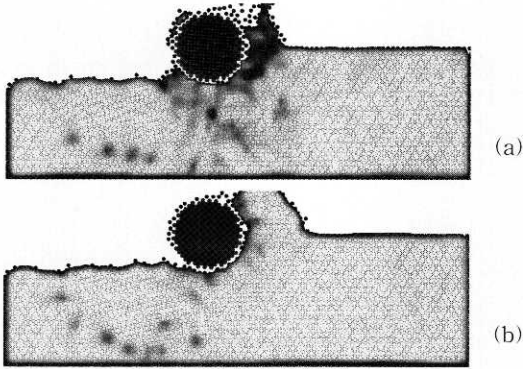


그림 8. $v_a = 125.6$ m/s에 해당되는 각속도를 가지는 나노입자의 제자리 회전 작용. (a) 그림 4(b) 경우에서 40 Å 이동하였을 때의 C/E 도면 (b) 360° 제자리 회전 작용 이후 C/E 도면.

Fig. 8. Rotating interaction with w_a corresponding to $v_a = 125.6$ m/s. (a) C/E plot when the abrasive moved 40 Å in the case of Fig. 4(b). (b) C/E plot after rotating of 360°.

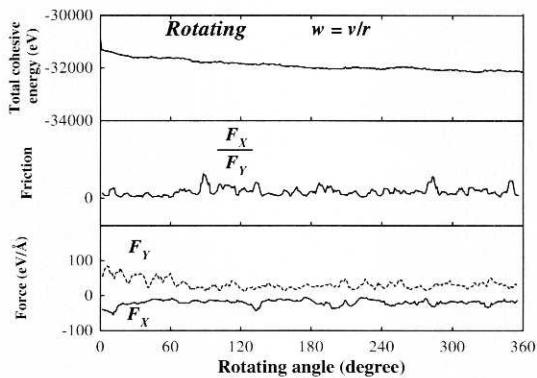


그림 9. 그림 8 경우의 총 원자 내부에너지, 작용력 및 마찰계수.

Fig. 9. Total cohesive energy, forces, and friction coefficient for the case of Fig. 8.

4. 결론 및 향후연구방향

본 연구에서는 CMP 공정의 기술적 중요성을 고려하여 CMP 공정에서 나노미터 영역에서 일어나는 나노입자와 기관사이 상호작용을 원자단위에서 모델링 하고 시뮬레이션 하였다. 절삭용 구형 나노입자의 운동을 미끄러짐, 구름, 제자리 회전으로 모델링하였으며, 이를 통하여 기관과의 상호작용을 연구하였다. 미끄러짐 작용과 구름 작용은 서로 다른 물리작용을 보여주었으며, 이를 실질적으로 CMP 공정에서 일어날 수 있는 구형 나노입자와 기관과의 상호작용의 다양성을 보여주었다. 본 연구 결과는 향후 실제 공정에 사용되어지는 물질에 대한 원자 구조 및 원자간 전위 함수들을 사용할 경우 원자단위에서 CMP공정을 모델링 할 수 있으며, 이를 발전시켜 실질적인 CMP 공정 원자단위 모델 및 시뮬레이터를 개발 할 수 있다는 것을 보여주었다.

본 연구에서는 CMP 공정에서 예상되는 구형나노입자의 운동역학과 기관 상호작용에 집중하였기 때문에, 실질적인 CMP 공정에서의 구형나노입자의 상대속도보다 빠른 상대속도가 고려되었다. 따라서 향후 연구는 실질적인 CMP 공정에서의 상대속도를 고려하고 일정한 압력이 절삭용 나노입자에 작용하는, 보다 실제적으로 공정에 사용되는 물질에 대하여 물리적 작용을 원자단위에서 모델링하여 시뮬레이션 할 것이며, 시뮬레이션을 3차원으로 확장 할 것이다. 또한 물리적 작용 이외 Monte Carlo 방법을 적용하여 CMP공정의 화학 반응을 모델링 할 것이다. CMP의 응용은 다른 여러 화학조성을 가지는 물질들과 물리적으로 다양한 강도의 구조를 가지는 물질들로도 확장될 것으로 기대되며, 현재의 물리, 화학, 반도체 및 기계 공학적인 응용을 넘어서 biotechnology에까지 확장될 것으로 예상되며 subcellular microsenor 및 microlaboratory에 까지 응용이 확장될 것으로 기대되기 때문에[1,4], 계속적인 연구는 미래의 차세대 CMP 공정에 대한 원자단위에서의 물리적 기초를 놓음으로써 계속적인 나노기술 개발에 기여할 것이다.

감사의 글

이 논문은 2003년도 중앙대학교 학술연구비 지원에 의한 것임.

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] R. Bajaj, A. Zutshi, R. Surana, M. Naik, and T. Pan, "Integration challengers for CMP of copper", MRS Bulletin, Vol. 27, No. 10, p. 776, 2002.
- [4] D. Evans, "The future of CMP", MRS Bulletin, Vol. 27, No. 10, p. 779, 2002.
- [5] 이경진, 김상용, 서용진, "반경험적인 실험설계 기법을 이용한 CMP 공정 변수의 최적화", 전기전자재료학회논문지, 15권, 11호 p. 932, 2002.
- [6] 김철복, 김상용, 서용진, "기계화학적 연마를 이용한 트렌치 구조의 산화막 평탄화", 전기전자재료학회논문지, 15권, 10호 p. 832, 2002.
- [7] 박장준, 김상용, 서용진, "실리카 슬러리의 회석과 연마제의 첨가가 CMP 특성에 미치는 영향", 전기전자재료학회논문지, 15권, 10호 p. 844, 2002.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] 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, No. 12, p. 1639, 2001.
- [11] T. H. Fang, S. R. Jian, and D. S. Chuu, "Molecular dynamics annalysis of effects of velocity and loading on the nano indentation", Jap. J. Appl. Phys., Vol. 41 Pt. 2, No. 11B, p. L1328, 2002.
- [12] T. H. Fang, C. I. Weng, and J. G. Chang, "Molecular dynamics simulation of nano-lithography process using atomic force microscopy", Surf. Sci., Vol. 501, No. 1-2, p. 138, 2002.
- [13] 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.
- [14] 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 Pt. 1, No. 4B, p. 2410, 2002.
- [15] 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.
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] 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.
- [19] 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.
- [20] 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.

- [21] 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.
- [22] 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.
- [23] 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.
- [24] M. P. Allen and D. J. Tildesley, "Computer Simulation of Liquids", Oxford, Clarendon, p. 71, 1987.