

<연구논문>

## 플라즈마 식각 공정에서의 미세구조 식각에 관한 이론적 연구

이창덕 · 박상규\*†

포항공과대학교 화학공학과 재료공정연구소

\*산업과학기술연구소

(1994년 2월 2일 접수)

## Theoretical Study of Microscopic Etching Shape Evolution in Plasma-Assisted Etching Processes

Chang-Deog Lee and Sang-Kyu Park\*†

Department of Chemical Engineering, Pohang University of Science and Technology (POSTECH)

Laboratory for Advanced Materials Processing (LAMP)

\*Research Institute of Industrial Science and Technology (RIST)

(Received February 2, 1994)

**요 약** - 플라즈마 식각 공정에서의 미세구조 식각 연구를 위하여 두 종류의 미세식각 진전 모델을 제시하였다. 모델 1에서는 Knudsen 확산 정도를 나타내는 Thiele 계수( $\Phi^2$ )의 변화와 마스크의 하전(charging)에 의한 이온의 회절이 식각 패턴에 미치는 영향을 고찰하였으며 모델 2에서는 이온의 충돌에 의한 분산효과가 식각패턴에 미치는 영향을 살펴보았다. 반응성 라디칼과 전압 분포에 대한 지배 방정식은 경계적분법을 이용하여 해를 구하였다. 모델 1로부터 라디칼의 확산저항이 수직방향으로의 식각깊이를 감소시켜 RIE Lag를 일으키며 마스크의 하전에 의한 이온의 회절에 의하여 "dovetailing" 형태의 식각패턴 형성의 원인이 됨을 알 수 있었다. 모델 2의 결과로부터 쉬스 지역에서의 이온의 분산이 심화될 수록 "bowing" 형태의 식각패턴이 두드러졌으며 RIE Lag 현상이 증가하는 것으로 나타났다.

**Abstract** - Numerical simulation for study of etching patten formation in the microscopic trench structure was performed using two different kinds of Microscopic Etch Shape Evolution Model(ME-SEM). In model 1, the Thiele modulus( $\Phi^2$ ) effect meaning the degree of diffusivity of reactive radical and ion deflection due to mask charging effect on the etch pattern was considered. In model 2, the effect of ion scattering due to the collision with neutrals in the sheath region on etched shape pattern was conducted. The governing equation for radical and potential distribution was solved using Boundary Integral Method(BIM). From the result of model 1, the diffusional resistance of radicals leads to the RIE Lags by decreasing of the vertical etched depth and ion deflection due to mask charging effect causes the etching pattern of "dovetailing." The result of model 2 showed that the more ion scattering in the sheath region, the more "bowing" etch pattern and RIE Lag phenomena.

### 1. 서 론

ULSI(Ultra Large Scale Integration) 집적회로 시

† Author to whom correspondence should be addressed

대에 접어들면서 플라즈마를 이용한 건식식각 공정은 전례없이 그 중요성이 증대되고 있다. 특히 집적회로의 박막의 두께와 선폭이 감소되고 소자의 구조가 복잡해지면서 플라즈마로 인해 발생하는 표면의 손상정도, 이방성 식각, 선택적 식각, 선폭의 제어, 균

일성 등이 점점 더 엄격히 요구되고 있다[1]. 플라즈마를 이용한 건식식각(dry etching) 공정이 1970년 초 개발되어 반도체 생산공정으로 각광을 받기 시작한 이후 깊은 도랑(deep trench)의 식각은 많은 공정 및 소자의 설계가들에 의해 주목을 받아왔으나 기본 원리의 복잡성 때문에 충분히 이해되지 못하였다. 플라즈마를 이용한 반응성 이온 식각공정은 현재 고속의 Bipolar 회로제조시 트랜지스터의 isolation[2], p-n well의 설계를 용이하게 하여 latch-up이 없는 CMOS[3] 및 고밀도 DRAM의 capacitor[4]의 생산 등에 널리 활용되고 있다. 게다가 점차로 집적회로의 밀도가 증가됨에 따라 종횡비가 큰 홈(hole)을 파는 식각 기술은 더욱 중요하게 되었으며 3차원 구조를 갖는 초고집적회로의 생산에 없어서는 안될 주요기술이 되었다. 64M DRAM급 이상의 초고집적회로의 제조 시에는 0.4  $\mu\text{m}$  이하의 선폭과 10 이상의 종횡비를 갖는 도랑구조를 벽면의 프로파일을 수직으로 유지하면서 빠른 속도로 식각할 수 있어야 한다. 그러나 식각된 도랑의 형태가 “dovetailing,” “bowing” 등 수직이 아닌 식각패턴이 형성되거나 또는 도랑 입구의 넓이에 따라 식각율이 달라지는 “RIE Lag” 현상이 일어나는 등 여러가지 문제점이 대두되고 있다. 이는 기관 근처에서 여러 종류의 물리, 화학적인 요소들이 복잡하게 작용하여 식각반응이 일어나기까지 영향을 주기 때문이며 이에 대한 근본적인 연구가 필요한 실정이다.

병모양의 벽면이나 도랑바닥의 “dovetailing” 등 수직이 아닌 식각패턴은 여러 실험에서 발견되었는데 이러한 현상의 주요원인은 이온의 회절에 의한 것이 아닌가 하고 추측되어져 왔다. Chin 등[5]은  $\text{SiO}_2$  마스크를 사용하여 poly-silicon을 식각하였을 때 형성된 깊은 도랑에서 병모양의 벽면형태(bowwell formation)를 발견하였다. 이와 같이 sidewall이 둥글게 파이는 현상은 종횡비가 큰 경우에 더 많이 발견되었으며 저자들은 이러한 현상이 부분적으로 불균일한 전계가 기인한 것이라고 해석하였다. Bruce와 Reinberg[6]는  $\text{Cl}_2$  플라즈마를 이용한 Si 식각실험에서 RF(Radio Frequency) 전압으로 가동되는 전극에 positive DC(direct current) bias 전압을 변화시키면서 그 영향을 조사하였다. Bias 전압은 식각율과 식각형태에 커다란 영향을 끼쳤는데 이는 양이온이 절연체(dielectric) 마스크를 하전(charging)시켜 생성된 불

균일한 전계가 들어오는 이온들을 회절시키기 때문이라 분석하였다. Gokan 등[7]은 산소 RIBE(Reactive Ion Beam Etching)를 이용한 photoresist 식각시 굽은 벽면형태를 관찰하였는데 이온의 에너지를 증가시킴에 따라 수직적인 벽면형태를 얻었다. 또한 Pogge 등[8]은  $\text{Cl}_2/\text{Ar}$  플라즈마를 이용, 높은 종횡비를 갖는 실리콘 홈(via hole)을 식각할 때 벽면에서 병모양의 식각형태의 형성을 관찰하였다. Ukai와 Hanazwa[9]는 수평방향으로의 식각패턴이 도랑의 입구 넓이에 의존한다는 것을 발견하였는데 이는 표면형태에 따라 쉬스의 전계가 변형되어서 들어오는 이온을 회절시키기 때문이라고 하였다. 다른 몇몇 연구자들은 전하를 띤 입자들의 빔에 노출되었을 때의 절연체 박막의 전압분포에 대해 연구하였다[10, 11]. 위에서 언급한 바와 같이 이온의 회절현상은 여러 실험에서 발견되었는데 특별히 깊은 도랑을 식각할 때나 절연체 마스크의 하전효과가 주요하게 일어날 때 나타남을 알 수 있다.

하전 현상에 의한 미세 식각패턴의 변화를 이론적으로 분석하기 위하여 많은 연구자들이 절연체 마스크가 하전되는 모델을 이용하여 분석을 시도하였다. Economou와 Alkire[12]는 마스크 하전의 주파수의 존성과 절연체 마스크에 의한 표면과 bulk의 전도효과를 고려하였다. Ingram[13]은 미세구조에서의 국부하전효과(localized charging effect) 역시 심한 이온회절을 일으킨다고 보고하였으며 Arnold와 Sawin[14]은 이러한 문제를 몇 가지 단순한 가정을 통하여 각 변수의 독립적인 효과를 연구, 보고하였다. RIE Lag 현상은 많은 실험을 통하여 관찰되어 왔으나 이 현상에 대한 이론적인 설명은 플라즈마와 식각반응 메카니즘의 복잡성 때문에 아직은 명확하게 밝혀져 있지 않다. 다만 RIE Lag를 일으킬 수 있는 요인은 도랑 내부에서의 분자들의 확산[15, 16], 하전효과[12, 14], 쉬스나 도랑 내부에서의 이온과 중성입자와의 충돌이나 이온과 벽면과의 충돌에 의한 이온분산[13, 17, 18] 등이 있다. Coburn과 Winters[15]는 반응물질이 도랑 내부로 확산하여 들어가는 동안 생성물과 충돌에 의한 RIE Lag 현상을 관찰하였다. 특히 식각율이 충분히 크고 생성물들이 도랑 바닥에 재흡착될 경우, 도랑 입구와 바닥 사이에는 압력구배가 존재하게 되고 이 압력구배가 바닥으로 전달되는 반응물의 확산을 방해하여 높은 종횡비를 가진 도랑보다 낮은

중형비를 가진 도랑의 경우가 식각율이 더 빠르다고 해석하였다. Avachev 등[16]은 이 문제를 도랑 내부로의 반응물, 이온, 생성물의 전달현상을 나타내는 적분방정식을 수치적분하여 보고하였다.

식각패턴에 대한 이론적인 연구는 주로 2차원 구조의 이동표면을 곡선으로 나타내는 이동전선의 궤적을 추적하기 위한 string법을 이용하여 수행되어 왔는데 이는 플라즈마 식각[19, 20], 이온 밀링(ion milling)[21], 스퍼터링[22], CVD[23] 등 여러 공정에 대한 분석에 사용되었다. 그러나 string법을 이용한 모델은 반응성 라디칼들의 확산에 의한 표면으로의 이동과 표면에서의 화학반응 메카니즘이 전혀 고려되지 않고 단지 박막 패턴의 구조에 의한 음영효과(shadowing effect) 즉, 기하학적인 효과만 고려한 것으로 실질적인 식각패턴 연구에는 적합하지 않기 때문에 이러한 점을 극복하기 위하여 Ulacia 등[18]은 이온의 입사각 분포도(angular standard deviation),  $\sigma$ 를 매개변수로 하는, 이온이 쉬스를 통과하면서 경험하는 분자와의 충돌에 의한 분산효과를 고려한 Angle-Depth 모델을 개발하였다. Economou와 Alkire [12]는 절연체 마스크의 하전에 의한 국부 전압차가 이온의 에너지에 미치는 영향을 고려하여 도랑의 패턴 변화에 대한 영향을 분석하였다. 그러나 이 모델에서는 반응성 라디칼에 대하여 도랑 내부로의 확산을 고려하지 않고 도랑 내부에서의 농도를 일정하다고 가정한 문제점이 있다.

따라서 본 연구에서는 식각패턴에 대한 근본적인 분석을 위하여 반응성 라디칼의 확산, 마스크의 하전, 이온의 분산효과와 표면반응을 고려한 미세식각 형상 진전모델(Microscopic Etching Shape Evolution Model: MESEM)을 개발하고 이에 대한 전산모사를 수행함으로써 식각패턴에 영향을 주는 인자 및 여러 중요한 현상들에 관하여 분석하였다. 이러한 이론적인 연구는 반응성 이온 식각의 기본 원리를 이해하고 나아가서 식각공정의 향상을 위해 유용하게 사용될 수 있을 것으로 생각된다.

## 2. 식각공정의 전산모사

플라즈마 반응기에서의 식각에 대한 정확한 이론적인 분석을 위해서는 다음과 같은 반응기내에서의 복잡한 물리/화학적인 현상들에 관한 연구가 종합적

으로 필요하다.

(i) 플라즈마 영역에서의 전하입자의 운동에 관한 방전 물리학

(ii) 전자와 중성입자와의 충돌에 의한 화학반응에 관한 플라즈마 화학

(iii) 기상에서의 중성입자의 운동, 열 및 물질전달 현상

(iv) 쉬스를 통과하는 이온의 플러스, 에너지, 그리고 각 분포에 대한 연구

(v) 표면에서의 반응성 라디칼 및 이온에 대한 화학반응 메카니즘

(vi) 미세박막의 식각패턴

특히 본 연구와 같은 미세 식각패턴에 관한 연구인 (vi) 분야에서는 (i)~(v) 분야로부터의 정보가 모두 필요하지만 이러한 종합적인 이론적 연구는 계산시간이 많이 필요하여 현재의 supercomputer로도 해를 얻는 것이 불가능하다. 따라서 본 연구에서는 MESEM을 이용하여 기판 근처에서의 기본적인 물리·화학적 법칙에 근거하여 시간에 따른 미세 식각패턴 프로파일의 이동을 전산모사하였다. 본 연구에서 고려한 수학적 모델은 크게 두 종류의 모델로 나뉘어지는데, 기본적으로 반응성 라디칼에 대한 확산방정식을 풀어 이동 표면에서의 반응성 라디칼의 농도를 구하는 방법은 두 모델에서 모두 동일한 방법으로 고려되었으나 이온에 대해서는 서로 다른 방법을 고려하였다. 모델 1에서는 전압에 대한 Poisson식의 해를 구하여 이로부터 전압과 전계의 분포를 얻은 후 운동 방정식을 이용하여 이온의 궤적을 추적함으로써 표면에 도달하는 이온의 플러스와 에너지를 구하였다. 따라서 마스크의 하전에 의한 이온의 회절현상을 고려할 수 있었으며 연속 방정식과 Monte-Carlo법을 동시에 사용하였다는 특징이 있다. 모델 2에서는 이온들이 쉬스 지역을 통과하면서 발생하는 분산효과를 Gaussian 분포와 가시각(view angle)을 이용하여 고려하였다. MESEM에 대하여 자세히 기술하면 다음과 같다.

### 2.1. 모델 1

#### 2.1.1. Two-region 쉬스 모델과 마스크 근처에서의 전압분포

2차원의 도랑구조에 대한 식각모델을 고려할 때 플라즈마내에서 형성된 이온은 플라즈마 쉬스경계에

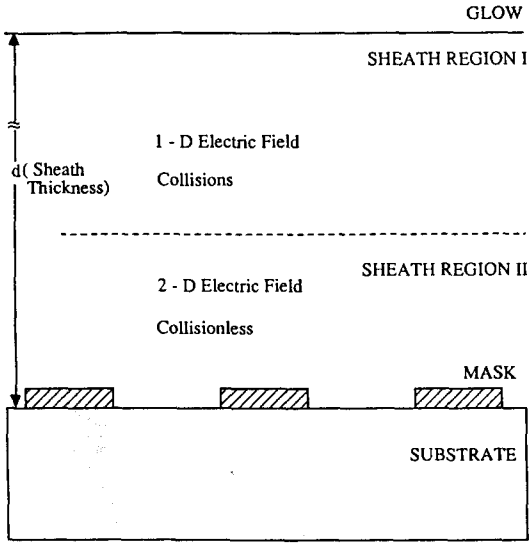


Fig. 1. Illustration of two sheath regions and surface features.

도달하면 강한 전계에 의해 가속되어 표면에 수직 방향으로 움직인다. 쉬스는 Fig. 1과 같이 표면으로부터 멀리 떨어져 영향을 입지 않는 지역(지역 I)과 표면의 형태나 마스크의 하전에 의한 전압의 변화로 이온이 회절하는 표면근처 지역(지역 II)으로 나눌 수 있다. 따라서 이온의 움직임은 지역 I에서는 수직방향으로 1차원적이며 영역 II에서는 수평방향의 전계에 의해 이온의 궤적이 영향을 받는 2차원적인 거동을 보인다. 쉬스의 두께는 보통 수  $\mu\text{m}$  정도이며 도랑의 크기를  $1 \mu\text{m}$ 이라고 볼 때 지역 II는  $10 \mu\text{m}$  이상은 되지 않으리라 생각되므로 지역 I과 지역 II의 경계가 표면에서 충분히 떨어져 있다고 할 때 이 경계에서의 이온은 1차원적 직선운동을 한다고 볼 수 있다. 그러므로 본 연구에서는 지역 II를 전산모사를 위한 영역으로 설정하였다. 지역 II를 확대하여 보다 자세하게 그린 전산모사 영역을 Fig. 2에 나타내었다.

지역 I과 II의 경계에서의 이온의 표류속도(drift velocity)와 전압은 연속 glow 방전 모델[25-27]에 의해서 조업조건을 고려하여 구하여야 하나, 이러한 모델은 매우 복잡한 계산과정이 필요하므로 본 논문에서는 고려하지 않았으며 간소화하여 일정속도를 갖는다고 가정하였다. 지역 II로 들어오는 이온은 수직 방향의 속도  $u_0$ 와 분산되어 움직이는 속도  $u_x$ 를 갖는다. 속도  $u_x$ 는 다른 중성입자와의 충돌시 일어나는

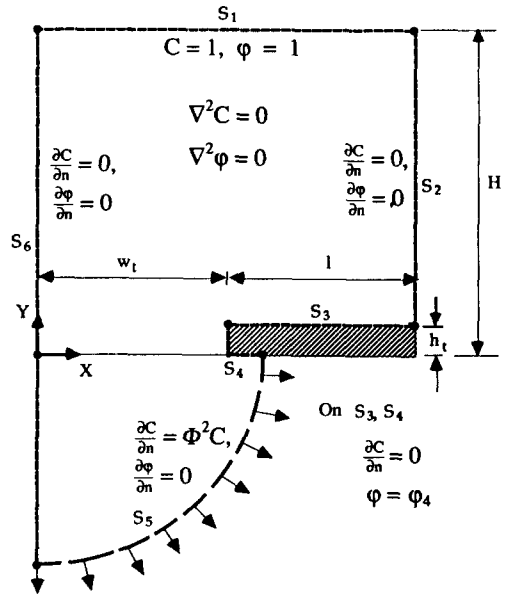


Fig. 2. Schematic diagram of computational domain for Model I.

분산 현상에 의한 것으로 보통 Monte-Carlo법을 이용하여 결정할 수 있으나 계산시간이 많이 걸리므로, 본 연구에서는 고려하지 않았다. 대신에 일정한  $u_x$  값을 가정, 입력함으로써 간단히 이온 분산효과를 고려할 수 있도록 하였다.

플라즈마에서의 이온의 밀도는 대략적으로  $10^{10}$  ions/cm<sup>3</sup>이며 기판 근처에서는 감소하여  $10^9$  ions/cm<sup>3</sup>으로 떨어진다. 따라서 각이온이 체류할 수 있는 부피는  $10^3 \mu\text{m}^3$  즉, 각 변의 길이가  $10 \mu\text{m}$ 인 정육면체에 해당된다. 지역 I의 두께가  $10 \mu\text{m}$  미만이고 지역 II에 다른 전하입자는 없다고 볼 수 있으며 이온의 평균 자유행로(ionic mean free path)가 보통  $50 \mu\text{m}$ 보다 크므로 도랑내에서의 전압분포는 Laplace식을 풀어 구할 수 있다. 전압분포를 얻기 위한 Laplace식은

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \tag{1}$$

로 표현되며 이에 대한 경계조건은 다음과 같다.

$$\phi = \phi_1 \quad \text{on } S_1 \tag{2}$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 \quad \text{on } S_2, S_6 \tag{3}$$

$$\phi = 0 \quad \text{on } S_5 \tag{4}$$

$$\phi=f(x) \quad \text{on } S_3, S_4 \quad (5)$$

마스크 표면에서의 ( $S_4$ ) 전압은 다음과 같이 일정하거나 포물선의 형태를 이룰 수 있다[24].

$$\phi=\phi_4=\text{constant} \quad (5a)$$

$$\phi=\phi_4=-\frac{\phi_0}{l^2}\left[x^2-2(w_l+l)x+w_l^2+2w_l l\right] \quad (5b)$$

여기서  $w_l$ 는 중심에서 마스크의 왼쪽 끝까지의 거리이고  $w_l+l$ 은 중심에서 마스크의 대칭선상까지의 거리이며,  $\phi_0$ 은 대칭선상에서 마스크의 전압이다. 보통 금속 마스크에서의 전압은 (5a)와 같이 일정하나 하전에 의하여 전류가 축적될 수 있는 절연체 마스크에서는 (5b)와 같이 포물선의 전압 프로파일을 갖는다.

본 연구에서는 이러한 변수들을 무차원화하였는데 그 방법은 다음과 같다. 우선 식 (1)을 무차원화하기 위하여 다음과 같이 정의하였다.

$$\varphi=\frac{\phi}{\phi_1}, \quad X=\frac{x}{H}, \quad Y=\frac{y}{H} \quad (6)$$

식 (6)을 식 (1)에 대입하면,

$$\nabla^2\varphi=\frac{\partial^2\varphi}{\partial X^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial Y^2}=0 \quad (7)$$

이 되며 경계조건인 식 (2)~(5)는 다음과 같이 표현된다.

$$\varphi=1 \quad \text{on } S_1 \quad (8)$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial X}=0 \quad \text{on } S_2 \text{ and } S_6 \quad (9)$$

$$\varphi=0 \quad \text{on } S_5 \quad (10)$$

$$\varphi=\frac{\phi_4}{\phi_1} \quad \text{on } S_3 \text{ and } S_4 \quad (11)$$

### 2.1.2. 이온 궤적, 속도 및 운동에너지

지역 II에서 Laplace식을 풀어 전압 분포가 얻어지면 이온의 궤적은 다음과 같이  $x$ 와  $y$  각 좌표에 대하여 운동 방정식을 풀어 구할 수 있다.

$$\frac{d^2x}{dt^2}=\frac{eE_x}{M_i}, \quad \frac{d^2y}{dt^2}=\frac{eE_y}{M_i} \quad (12)$$

여기서  $E_x$ 와  $E_y$ 는  $x$ 와  $y$  방향으로의 전계의 세기이며

$M_i$ 는 이온의 질량이다. 전계분포는 식 (1)~(5)의 해를 구하여 얻어질 수 있으며 이온에 작용하는 힘은 오직 전계라고 가정하고 식 (12)을 풀기 위해서는 이온의 속도를 계산하여야 한다. 이온의 속도는

$$u_x=\frac{dx}{dt}, \quad u_y=\frac{dy}{dt} \quad (13)$$

이며 초기 조건으로  $S_1$ 에서  $u_x=u_x, u_y=u_0$ 으로 가정하였다. 이온이 지역 II에서 중성입자와 충돌하여 분산하게 되면  $u_x$ 은 일정한 값을 가질 수 있는데  $u_x$ 은 특히 분산이 커지는 경우, 예를 들면, 압력이 증가하는 경우에 큰 값을 가지게 되나, 대부분의 식각공정에서 이러한 값은 수직방향의 속도에 비하여 아주 작으므로 본 논문에서는  $u_x=0$ 인 경우, 즉 이온의 수직 운동만 있는 경우만을 고려하였다. 특정 시간에서 이온의 에너지는 다음과 같다.

$$\varepsilon_i=\frac{1}{2}M_i(u_x^2+u_y^2) \quad (14)$$

무차원화하기 위해서 무차원 시간  $\tau$ 을 다음과 같이 정의하였다.

$$\tau=\frac{tu_0}{H} \quad (15)$$

여기서  $u_0$ 는 지역 II로 들어오는 이온의 표류속도이다. 식 (6), (15)을 식 (12)~(14)에 대입하면 다음과 같다.

$$\frac{d^2X}{d\tau^2}=\frac{e\phi_1}{M_i u_0^2}\left(-\frac{\partial\varphi}{\partial X}\right)=\frac{1}{2}\Omega\left(-\frac{\partial\varphi}{\partial X}\right) \quad (16a)$$

$$\frac{d^2Y}{d\tau^2}=\frac{e\phi_1}{M_i u_0^2}\left(-\frac{\partial\varphi}{\partial Y}\right)=\frac{1}{2}\Omega\left(-\frac{\partial\varphi}{\partial Y}\right) \quad (16b)$$

$$U_x\equiv\frac{u_x}{u_0}=\frac{dX}{d\tau} \quad (17a)$$

$$U_y\equiv\frac{u_y}{u_0}=\frac{dY}{d\tau} \quad (17b)$$

$$\varepsilon_i^*\equiv\frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_0}=U_x^2+U_y^2 \quad (18)$$

여기서  $\Omega$ 는 이온 회절정도를 나타내는 무차원 변수로써 그 정의와 물리적 의미는 다음과 같다.

$$\Omega=\frac{e\phi_1}{\frac{1}{2}M_i u_0^2}$$

$$= \frac{\text{전계에 의해 가해지는 이온의 에너지}}{\text{지역 II로 들어오는 이온의 운동에너지}} \quad (19)$$

따라서  $\Omega$ 의 값이 크면 마스크 하전 현상에 의한 이온의 회절정도가 크고  $\Omega$ 의 값이 작으면 그 반대의 의미를 가진다. 이온의 에너지를 무차원화하기 위한 기준 운동에너지  $\varepsilon_0$ 는  $\varepsilon_0 = 1/2M_i u_0^2$ 으로 정의하였다.

### 2.1.3. 반응성 라디칼의 농도분포계산

도량내에서의 반응성 라디칼의 농도분포를 계산하기 위하여 다음과 같은 확산 방정식을 고려하였다.

$$D_k \nabla^2 c = 0 \quad (20)$$

이에 대한 경계조건은

$$c = c_0 = \text{constant} \quad \text{on } S_1 \quad (21)$$

$$\frac{\partial c}{\partial n} = 0 \quad \text{on } S_2, S_3, S_4, S_6 \quad (22)$$

$$D_k \frac{\partial c}{\partial n} = k_n c^\gamma \quad \text{on } S_5 \quad (23)$$

와 같이 표현할 수 있는데 여기서  $n$ 은 특정표면에서의 수직방향의 벡터를 의미한다. 식 (23)에서 우변은 반응성 라디칼에 의한 화학적 식각을 나타내며  $k_n$ 은 화학적 식각반응상수이다.  $\gamma$ 은 반응차수로서 비선형 경계조건(즉  $\gamma \neq 1$ )인 경우에 계산이 복잡해지기 때문에 1차 반응식( $\gamma=1$ )을 가정하였다. 여러 연구자들이 실험을 통하여 화학적 식각율이 라디칼 농도에 비례한다는 보고를 하였으므로 이러한 가정은 별무리가 없을 것으로 생각된다[28, 29]. 여기서  $D_k$ 는 Knudsen 확산계수로서 본 연구에서 고려한 직사각형 도량구조에 대한 Knudsen 확산계수는 다음과 같이 표현된다 [30].

$$D_k = \frac{2w_i}{3} \sqrt{\frac{8RT}{\pi M}} \quad (24)$$

여기서  $R$ 은 기체상수이고  $T$ 는 기상의 온도,  $M$ 은 라디칼의 질량이다. 확산 방정식 (20)와 경계조건 (21)~(23)를 만족시키는 해를 구하면 도량내부 및 경계에서 라디칼의 농도를 알 수 있다. 반응성 라디칼에 대한 지배 방정식과 변수들을 무차원화하기 위해 무차원 농도  $C$ 를  $C=c/c_0$ 로 정의하여 식 (20)~(23)에 대입하면 다음과 같다.

$$\nabla^2 C = 0 \quad (25)$$

$$C = 1 \quad \text{on } S_1 \quad (26)$$

$$\frac{\partial C}{\partial n} = 0 \quad \text{on } S_2, S_3, S_4, S_6 \quad (27)$$

$$\frac{\partial C}{\partial n} = \Phi^2 C \quad \text{on } S_5 \quad (28)$$

여기서 Thiele modulus,  $\Phi$ 는  $(k_n H / D_k)^{1/2}$ 로 정의되며 따라서  $\Phi^2$ 는 표면반응속도와 확산속도의 비를 의미한다. 그러므로  $\Phi^2$ 의 값이 작으면 표면반응단계가 율속단계(rate-determining step)가 되며 반대로  $\Phi^2$ 이 큰 경우에는 확산에 의한 물질전달이 율속단계가 된다.

### 2.1.4. 표면 식각반응 메커니즘과 총식각율

표면화학 반응 메커니즘은 반응성 이온 식각공정에서 가장 이해가 안된 분야 중의 하나인데 이는 플라즈마에서 생성된 이온, 라디칼, 전자, 광자들이 복합되어 식각반응에 참여하기 때문이다. 이 중에서 식각반응을 일으키는 주요 성분은 양이온과 라디칼이다. 여러 형태의 식각반응이 일어나지만 주요한 식각반응으로는 스퍼터링, 화학적 식각, 이온 원조 식각의 크게 3가지로 분류할 수 있다. 스퍼터링이란 고에너지 (>20 eV)의 이온에 의하여 표면물질의 결합력이 분해되어 표면 원자들이 방출되는 반응이다. 스퍼터링의 경우 화학적인 반응은 전혀 관계되지 않고 순수한 물리적인 에너지 전달에 의한 것으로서 보통  $10^{-3}$  torr 정도의 저압에서 주로 일어나므로 본 연구에서는 이를 고려하지 않았다. 화학적 식각은 전자 충돌 해리 반응에 의해 기상에서 생성된 반응성 라디칼에 의한 것으로서 0.1~수 torr 정도의 비교적 높은 압력에서 일어나며 화학반응이므로 기판 온도에 대한 의존성이 높고 식 (20)에서 보듯이 등방성을 갖는 기체의 확산에 의해서 일어나므로 마스크 밑으로의 undercut의 주요 원인이 된다. 앞에서 설명하였듯이 라디칼에 의한 화학적 식각율은 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$R_n = \Phi^2 C \quad (29)$$

이온 원조 식각은 반응성 이온에 의한 것으로 고에너지의 이온에 의해서 손상된 표면에 화학반응이 더 쉽게 일어나는 것으로 이온 자체가 반응성을 가질 수도 있고 손상된 표면에 라디칼이 반응할 수도 있다.

이 반응 메카니즘은 매우 복잡하며 정확한 메카니즘은 아직 확실하게 규명되지는 않았으나 이온 플럭스  $I_i$ 와 이온에너지  $\epsilon_i$ 에 관계가 있음을 추정할 수 있고 라디칼 농도  $C$ 도 관계할 수 있다. 다른 연구자들의 실험 결과 [31, 32]에 의하면 이온 원조 식각은  $I_i$ 에 비례한다고 알려져 있으나 이온에너지에 대한 함수관계는 시스템마다 틀리다. 예를 들면  $Cl_2$  플라즈마를 이용하여 Si를 식각할 때에는 이온에너지에 실험적으로 비례하나 Al을 식각할 때에는 이온에너지에 무관하다는 보고가 있다[33, 34]. 표면을 때리는 이온의 에너지가 클 수록 이온 원조 식각율이 증가할 수 있다는 추정 하에 무차원화된 이온 원조 식각율은

$$R_i = k_i I_i^* \epsilon_i^m C^n \quad (30)$$

과 같이 표현할 수 있다. 여기서  $k_i$ 는 이온 식각상수이다. 본 연구에서는 이온 원조 식각율이 라디칼에 무관하다고( $n=0$ ) 보았으며 이온에너지에 비례한다고( $m=1$ ) 가정하였다. 화학적 식각과 이온 원조 식각이 동시에 진행되므로 총 식각율은

$$R_i = R_n + R_i = \Phi^2 C + k_i I_i^* \epsilon_i^* \quad (31)$$

와 같이 표현될 수 있다. 그러나 식 (31)과 같이 화학적 식각과 이온 식각의 선형적인 합인 경우에는 가장 간단한 경우로서 라디칼의 흡착, inhibitor의 표면오염, 방출된 표면물질의 재증착, 표면 clearing이나 damage 메카니즘이 작용하면 훨씬 더 복잡해질 수 있다. 만약 *in-situ* 표면 분석실험을 통하여 반응 메카니즘이 다르게 규명될 경우에는 식 (31) 대신에 적절한 다른 반응식을 사용하여 비교 분석할 수 있음을 알려둔다. 본 연구에서 고려한 모델 시스템에 대한 전산모사 영역과 지배 방정식, 그리고 경계조건을 종합하여 Fig. 2에 나타내었다.

2.2. 모델 II

모델 2의 가장 중요한 가정은 들어오는 이온 플럭스가 입사각에 대해 정규 분포를 이룬다는 것이다. 이온 플럭스의 입사각에 대한 분포도는 식 (32)에 의해 결정된다[18].

$$I_i^* = \frac{I_i}{I_{i,0}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left[-\frac{\theta^2}{2\sigma^2}\right] \quad (32)$$

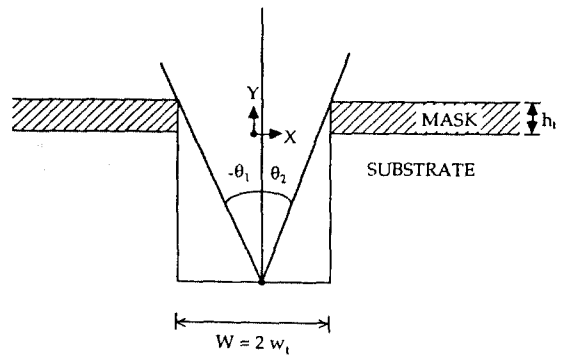


Fig. 3. Schematic diagram of computational domain showing the angle dependence ions arriving at bottom of trench for Model II.

여기서  $I_i$ 는 입사각에 의존하는 이온 플럭스,  $I_{i,0}$ 는 열린 표면에서의 총 이온 플럭스의 양,  $\theta$ 는 표면의 법선에 대한 입사각,  $\sigma$ 는 이온들이 쉬스를 통과하면서 중성입자와 충돌할 때 발생하는 이온의 분산효과를 나타내는 매개변수로서 쉬스 두께와 이온의 평균자유경로의 비에 비례하는 함수관계를 가진다[35]. 즉 쉬스 두께가 증가할 수록, 평균자유경로가 감소할 수록 분산효과가 증가됨을 의미한다. 도랑내부 각 점에서의 이온 플럭스는 Fig. 3과 같이 각 점에서 볼 수 있는 전입사각에 대해서 식 (32)를 적분하여 얻는다.

이때 적분은 식 (33)과 같이 나타낼 수 있다.

$$I_{i,t}^*(X, Y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \int_{\theta_1}^{\theta_2} \exp\left[-\frac{\theta^2}{2\sigma^2}\right] d\theta \quad (33)$$

여기서  $I_{i,t}^*(X, Y)$ 는 좌표( $X, Y$ )를 갖는 식각표면의 한 점에서의 총 이온 플럭스이다. 여기서  $\theta_1$ 과  $\theta_2$ 는 식 (34)에 의해 구해질 수 있다.

$$\theta_1 = \tan^{-1}\left(\frac{w_i + X}{h_i - Y}\right), \quad \theta_2 = \tan^{-1}\left(\frac{w_i - X}{h_i - Y}\right) \quad (34)$$

Fig. 3은 모델 2에 사용된 도랑의 구조에 대하여 나타내었다. 식 (33)에 의해 얻어진 각 입사각에서의 들어오는 이온들의 정규화 플럭스(normalized flux)는 Gaussian 분포를 나타내어 주는데  $\sigma$ 의 값이 커질 수록 이온들의 분산이 심해져서 입사각 전체에 대해서 고르게 이온들이 들어오는 것을 볼 수 있다. 모델 2에서의 반응성 라디칼의 농도 분포는 모델 1에서와 같은

방법으로 구하였다.

모델 2에서 이온에 의한 식각속도는 식각표면 위의 각 점에 도달하는 이온의 에너지는 동일하다고 가정하여

$$R_i = k_i J_{i1}^* (X, Y) \tag{35}$$

으로 나타내었다.

### 2.3. 경계적분법(Boundary Integral Method)

본 연구에서는 전압과 반응성 라디칼 농도에 대한 2차원 Laplace 방정식의 해를 구하기 위하여 경계적분법(Boundary Integral Method, BIM)을 사용하였다 [36, 37]. 경계적분법은 3차원이나 2차원 편미분 방정식을 각각 2차원 혹은 1차원 적분 방정식으로 전환하는 Green의 이론을 기초로 하며 이러한 차원을 낮추어 주는 장점 뿐 아니라 수치해석을 위한 좌표계 구성이 필요하지 않다는 잇점이 있다. 또한 계의 전 영역을 다루는 유한요소법과는 달리 계의 경계면만을 취급하므로 미지수가 적고 특히 시간에 따라 형태가 변하는 경계를 가진 문제(moving boundary value problem)에서 많이 사용되고 있다.

미분 방정식을 적분방정식으로 전환시키는 제 2 Green의 이론은 다음과 같다.

$$\int_D (u \nabla^2 G - G \nabla^2 u) dA = \int_S \left( u \frac{\partial G}{\partial n} - G \frac{\partial u}{\partial n} \right) dS \tag{36}$$

여기서  $u$ 는 Laplace 방정식( $\nabla^2 u = 0$ )을 만족시켜 주는 구하고자 하는 변수이고  $G$ 는 자유공간(free space) Green 함수로 2차원 영역에서는  $G = -\ln r = -\ln|\xi - x|$ 의 값을 가진다. 이를 식 (36)에 대입하면

$$\beta u(x) = - \int_S \left( u \frac{\partial(-\ln r)}{\partial n} + \ln r \frac{\partial u}{\partial n} \right) dS_\xi \quad \text{for } x \in D \tag{37}$$

2차원 문제에서  $\beta$ 는 경계에 있는 한 점에서의 내 각이다. 식 (37)을 다시 정리하면 식 (38)와 같이 된다.

$$\beta u(x) = - \int_C \left[ \frac{\partial u}{\partial n} \right] \ln r dS_\xi + p \int_C u d\theta \tag{38}$$

여기서  $\theta(x, \xi)$ 는 절점(cut point)  $x$ 와 벡터  $(\xi - x)$  사이의 각도,  $p$ 는 주치(principle value)이다. 식 (38)은

$$p \int_C u d\theta = \beta u(x) - p \int_C \theta du \tag{39}$$

의 관계에 의해서 식 (40)과 같이 정리할 수 있다.

$$p \int_C \theta(x, \xi) du(\xi) + \int_C \left[ \frac{\partial u(\xi)}{\partial n} \right] [\ln r(x, \xi)] dS_\xi = 0 \tag{40}$$

Laplace 방정식을 적분 방정식으로 변환한 식 (40)을 수치적분하기 위해서 차분화하고 또한 식을 간단하게 하기 위해  $v \equiv \partial u / \partial n$ 으로 정의한 후  $Bu + Av = 0$  형태의 선형 방정식으로 표현하여 식 (40)은 식 (41)으로 나타낼 수 있다.

$$[B_1 | B_2 | B_3 | B_4 | B_5 | B_6] \begin{bmatrix} u_1^* \\ u_2^* \\ u_3^* \\ u_4^* \\ u_5^* \\ u_6^* \end{bmatrix} = - [A_1 | A_2 | A_3 | A_4 | A_5 | A_6] \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2^* \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6^* \end{bmatrix} \tag{41}$$

식 (41)를 다시 정리하면,

$$[A_1 | A_2 | A_3 | A_4 | A_5 | A_6] \begin{bmatrix} v_1 \\ u_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ u_6 \end{bmatrix} = - [B_1 | B_2 | B_3 | B_4 | B_5 | B_6] \begin{bmatrix} u_1^* \\ v_2^* \\ u_3^* \\ u_4^* \\ u_5^* \\ v_6^* \end{bmatrix} \tag{42}$$

여기서 상첨자 \*가 있는  $u_1^*, v_2^*, u_3^*, u_4^*, u_5^*, v_6^*$ 는 식 (8)~



(11), (26)~(28)에 의해 경계조건으로 주어진 값들이고 상첨자 \*가 없는  $v_1, u_2, v_3, v_4, v_5, u_6$ 는 미지의 값들이다. 특히 반응성 라디칼에 대한 식각 표면에서의 경계조건은  $u, v$ 가 결합된 형태( $u_6=C_6, v_6=\partial u_6/\partial n = \partial C_6/\partial n = \Phi^2 C_6^0$ )로 주어지게 되는데 반응식이 선형일 경우 식 (42)은  $\bar{C}\bar{x}=\bar{d}$ 의 형태로 변환하여 Gauss 소거법을 이용하여  $\bar{x}$ 를 구할 수 있다.

### 3. 결과 및 고찰

일단 중앙선에 대해 대칭이므로 계산시간을 줄이기 위하여 Fig. 2과 같이 지역 II의 반만을 전산모사 영역으로 고려하였다. 매시간마다 반응성 라디칼에 대한 확산 방정식 (26)를 풀어 농도 분포를 구하였으며 또한 전압에 대한 Laplace 식 (7)을 풀어 전압 분포를 구한 후 이를 이용하여 전계의 세기를 구하였다. 이온의 운동 방정식 (16)은 Runge-Kutta법을 이용하여 풀었으며 이로부터 이온의 궤적을 추적하였다. 이때 지역 I과 지역 II 경계면의 위치와 속도가 초기 조건으로 주어졌으며 이온의 궤적은 일정 갯수(1000개)의 이온을  $S_1$  경계선상에 놓고 식 (16)을 풀어 얻어지는 속도에 의해 이온들을 이동시켜 구하였으며 마스크와 박막표면은 완전 흡수 표면(perfectly absorbing surface) 즉, 이온이 반사되지 않는다고 가정하여 마스크에 도달하는 이온은 더 이상 고려하지 않았다. 표면에서의 이온의 플럭스는 표면에 도달하는 이온의 갯수를 세어 계산하고 이온의 에너지는 식 (18)에 의해 계산하였다. 주어진 경계선에서의 반응성 라디칼의 농도와 이온의 에너지와 플럭스로부터 이동 전선상의 각 점  $j$ 에서의 총식각률  $R_j$ 는 식 (31)을 이용하여 구하고 계산된 총식각률로부터 string법을 이용하여 새로운 위치를 계산하였다. 위와 같은 과정을 반복하여 시간에 따른 미세 식각패턴의 이동 프로파일을 얻었다. 본 연구에서는 VAX8800을 사용하여 전산모사를 수행하였는데 보통 화학적 식각만을 고려한 경우 time step이 5까지 전산모사하는데 소요된 CPU 시간은 약 4 min 정도였으며, 마스크 하전에 의한 이온의 회절과 화학적 식각을 동시에 고려한 경우에는 6시간 정도가 소요되었다. 모델 1에서 마스크 하전이 없는 경우와 모델 2에서는 전압에 대한 Laplace 방정식을 풀 필요가 없으므로 계산시간이 훨씬 단축되는데 단순히

이온에 의한 식각만을 고려한 경우 1분 이내의 CPU 시간이 소모되었다. 모델 2에서는 전압 방정식과 운동 방정식을 풀지 않고 식 (33)에 의하여 각 점에서의 이온 플럭스를 산출하여 이로부터 이동전선의 속도를 결정하여 위치를 계산하였다. 이상과 같이 해를 구하는 과정에 대한 흐름도(flowchart)를 Fig. 4에 나타내었다.

식각패턴의 결과 분석을 위하여 종횡비(aspect ratio), 이방성(anisotropy), RIE Lag를 다음과 같이 정의하였다.

$$\text{종횡비(Aspect Ratio), } AR_k = h_k/w_k \quad (43)$$

$$\text{이방성(Anisotropy), } An_k = 1 - UC_k/Y_k \quad (44)$$

$$\text{RIE Lag} = 1 - Y_k/Y_0 = (Y_0 - Y_k)/Y_0 \quad (45)$$

여기서 하첨자  $k$ 는 식각전의 서로 다른 종횡비를 갖는 도랑을 구분하기 위해서 사용하며 따라서  $w_k$ 와  $h_k$ 는 각각  $k$ 번째 도랑의 입구 넓이와 마스크의 높이를,  $UC_k$ 는  $k$ 번째 도랑에서의 undercut을 의미한다.  $Y_0$ 는 마스크가 없는 평평한 구조에서의 박막을 일정한 시간 동안 식각한 후의 식각된 깊이이고  $Y_k$ 는  $k$ 번째 도랑 구조에서의 식각된 깊이이다.

본 연구에서 고려한 MESEM에는 여러 변수들이 있고 모든 경우를 다 조사할 수 없으므로 기본 변수 값을 설정하고 이로부터 한 변수만을 변화시켜가며 변수의 영향을 조사하였다. 기본 변수값과 조사한 변수 범위를 Table 1에 나타내었다. 여기서 주의할 점은 화학적 식각만 있는 경우, 이온 원조 식각만 있는 경우, 두 가지 식각 메카니즘이 동시에 관여하는 경우는 그림 설명에 명시하였다. 특별히 서술하지 않는 한 전산모사 결과는 기본 변수값에서 실시한 것이다.

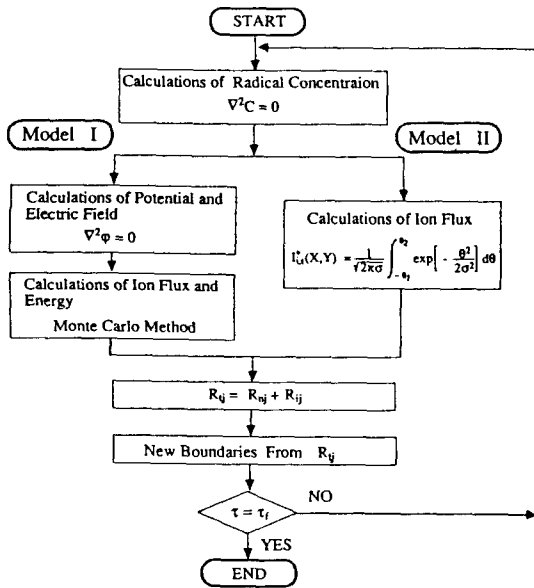
#### 3.1. 모델 1

##### 3.1.1. 화학적 식각만 있는 경우

Fig. 5은 주로 조업 압력이 높아서 이온의 평균 자유 경로가 짧고 전계의 세기가 약해서 표면 식각반응이 주로 반응성 라디칼에 의한 화학적 식각으로 진행되는 경우의 전산모사 결과에 의한 식각형태를 나타낸 그림이다. 여기서 종횡비(AR)는 1이고 무차원 시간  $\tau = 1 \sim 5$ 까지 각 식각형태의 진행을 나타내었다. 그림에서 볼 수 있듯이 반응성 라디칼에 의한 화학적 식각만 존재하는 경우에도 수직방향의 식각률과 수평방향의

**Table 1.** Basic parameter values and range of parameters examined

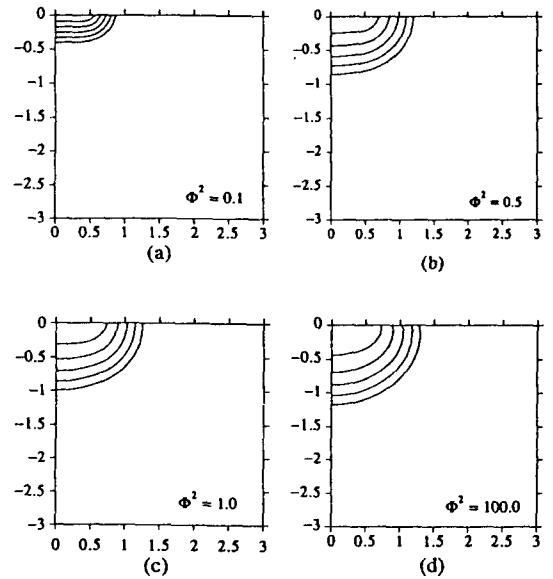
Parameter	Basic value	Ranges
$\Phi^2$	10	0.1~1000
$k_i$	0.5	0.1~1
$W(=2w_i)$	1	0.2~2
$h_i$	1	0.1~1
$W$	0	0~1
$\sigma$	10	1~15



**Fig. 4.** Flowchart of the calculation procedure based on the MESEM.

식각율이 같은 등방적 식각이 아닌 어느 정도 이방적인 식각이 일어남을 알 수 있는데 이는 마스크 아래 부분에서의 기하학적 음영효과(shadowing effect)에 의하여 라디칼의 수직방향으로의 확산보다는 수평방향으로의 확산이 용이하지 않기 때문으로 여겨진다. 또한 시간이 진행됨에 따라서 수직방향으로의 식각율이 감소하는 것을 볼 수 있는데 이는 식각깊이가 깊어질 수록 확산에 대한 저항의 증가와 식각표면이 증가하여 라디칼의 고갈 현상(depletion)을 가속시키는 국부적인 loading 효과가 작용하기 때문인 것으로 해석된다.

Fig. 6은 일정한 Thiele 계수( $\Phi^2=10$ )에서 종횡비 ( $AR$ )에 따른 식각형태의 영향을 살펴본 것이다. 이



**Fig. 5.** Etched pattern profiles with chemical etching only at  $AR=1$  for (a)  $\Phi^2=0.1$ , (b)  $\Phi^2=0.5$ , (c)  $\Phi^2=1$  and (d)  $\Phi^2=100$ .

경우에 고려한 종횡비는 초기 도랑의 높이를 폭으로 나눈 값으로 마스크의 두께를 일정하다고 보고 단지 입구의 폭만을 감소시켜  $AR$ 값을 변화시켰다. 예를 들면, 본 연구에서 고려한 마스크의 두께는 1이므로  $AR$ 이 0.5일 때에는 식 (43)의 정의에 의하여 마스크의 입구 넓이가 2이며  $AR$ 이 1로서 2배 증가하게 되면 마스크의 입구 넓이는 1이 되어 반으로 감소함을 의미한다.  $AR$ 이 증가할 수록 식각율이 현저하게 감소하게 되는 것을 볼 수 있는데 이는  $AR$ 이 증가할 수록 라디칼이 확산하여 들어올 수 있는 입구의 넓이가 감소하게 되어 확산 저항이 증가하게 되는 것으로 여겨진다.

Fig. 7은 마스크의 입구 넓이가 2일 때  $\Phi^2$ 의 변화에 따른 식각깊이를 무차원 시간  $\tau=1, 5$ 일 때와 마스크의 높이가 각각 0.1, 0.5, 1.0일 때 나타낸 그림이다. Fig. 5에서도 관찰된 바와 같이  $\Phi^2$ 가 작은 영역에서는  $\Phi^2$ 가 약간 증가하여도 식각깊이가 크게 증가하였으나  $\Phi^2$ 가 10보다 큰 영역에서는  $\Phi^2$ 가 같은 비율로 증가하여도 더이상 식각깊이가 증가하지 않음을 볼 수 있다. 이는 확산에 의한 도랑 바닥으로의 물질전달보다 식각반응이 더 빠르게 진행되어 더 이상 반응할 라디칼이 충분하지 못한 물질전달 율속단계에 들어

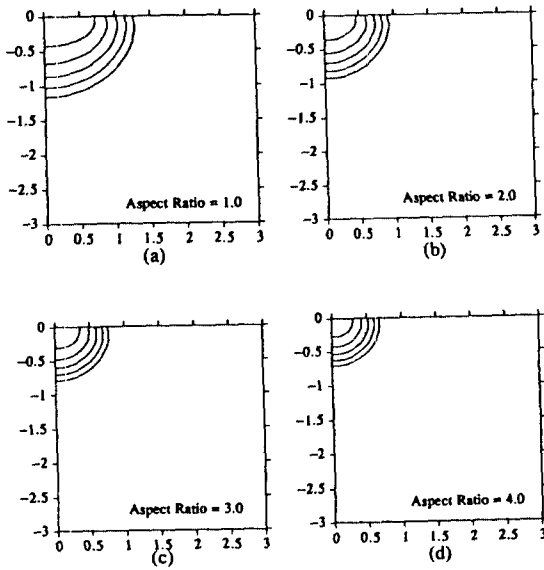


Fig. 6. Etched pattern profiles with chemical etching only at  $\Phi^2=10$  for (a)  $AR=1$ , (b)  $AR=2$ , (c)  $AR=3$  and (d)  $AR=4$ .

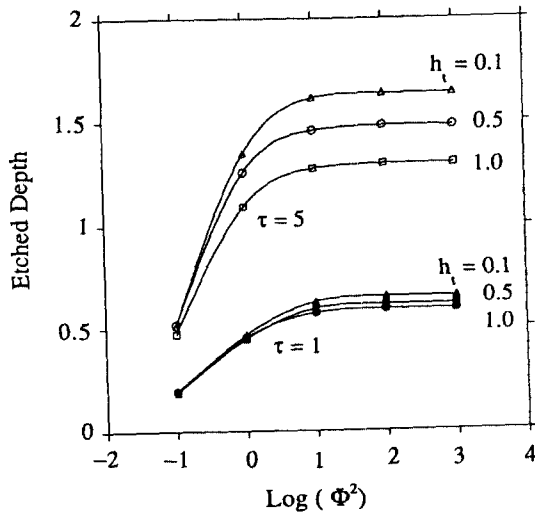


Fig. 7. Effect of Thiele modulus ( $\Phi^2$ ) on the etched depth for various mask heights at  $\tau=1$  and  $5$ .

가기 때문이라 생각되며  $\Phi^2=10$ 이 반응율속단계에서 물질전달 율속단계로 전환되는 Thiele 계수값으로서 식각시간이나 마스크 두께에 의해서 크게 영향을 입지 않음을 알 수 있다. 또한 Fig.7로부터 식각시간이 길어질 수록 그리고  $\Phi^2$ 이 증가할 수록 마스크의 두께가 식각깊이에 더 큰 영향을 미치는 것을 알 수 있다.

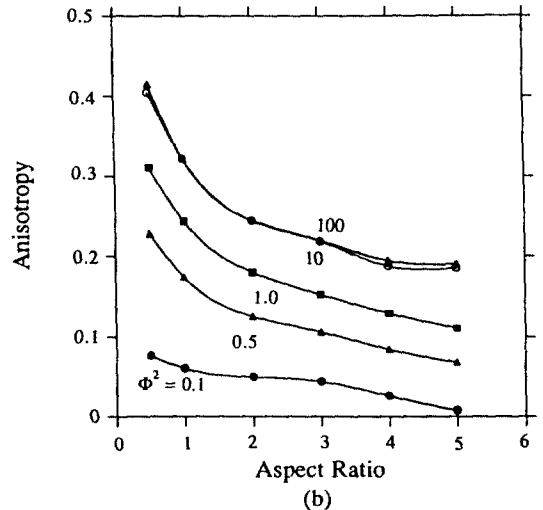
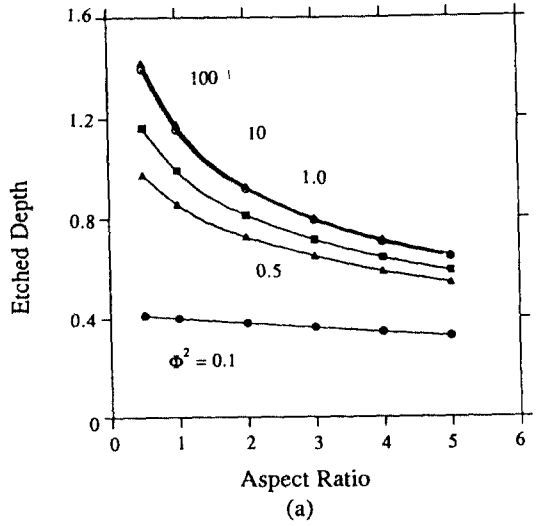


Fig. 8. Effect of aspect ratio ( $AR$ ) on (a) etched depth and (b) anisotropy for various Thiele moduli ( $\Phi^2$ ) at  $\tau=5$ .

이는 식각반응 초기에는 식각이 어느 정도 진행되지 않아 마스크의 두께가 커더라도 도랑입구와 마스크 위의 반응성 라디칼이 농도 구배에 의한 확산에 의해 보충이 용이하게 이루어지기 때문이며 식각시간이 경과할 수록 식각깊이가 깊어져 도랑 바닥까지 라디칼이 보충되기가 쉽지 않기 때문이라 생각된다. 이러한 현상은 라디칼의 고갈이 심화되는 큰  $\Phi^2$ 값에서 뚜렷하게 나타나나  $\Phi^2=10$  이상에서는 마스크 두께에 대한 식각깊이가 더 이상 크게 변화하지 않는 것으로 미루어  $\Phi^2=10$ 에서 이미 라디칼 고갈 현상이 주도적

으로 작용하는 것으로 생각된다.

Fig. 8은 화학 식각만이 반응에 관여할 경우에  $\tau=5$ 에서의 AR에 따른 식각깊이와 이방성을 여러  $\Phi^2$ 에 대하여 살펴본 그림이다. 여기서 고려한 AR은 마스크의 두께는 일정하다고 보고 단지 도랑 입구의 폭만을 변화시켜 가면서 살펴본 것이다. Fig. 8(a)에서 보듯이  $\Phi^2$ 가 큰 경우에  $\Phi^2$ 가 작은 경우에 비해서 AR이 증가할 수록 식각깊이는 큰 폭으로 감소하는 것을 볼 수 있다. 이는  $\Phi^2$ 가 작은 경우 표면반응속도가 율속단계가 되므로  $\Phi^2$ 가 증가할 수록 식각깊이가 증가하게 되지만 어느 정도 이상의  $\Phi^2$ 에서는 확산에 의한 라디칼의 물질전달이 율속단계가 되는 현상이 더욱 심화되어 식각 깊이가 급격하게 감소함을 볼 수 있다. 또한  $\Phi^2$ 가 커질 수록 초기에 빠른 속도로 식각되어 식각될 수 있는 표면적이 더 빨리 증가하여 라디칼의 고갈 현상이 더욱 심화되어 급격하게 식각 깊이가 감소되는 것으로 생각된다. 이러한 수직방향으로의 식각깊이의 차이가 커진다는 것은 식 (45)의 정의에 의하여 RIE Lag 현상이 심화됨을 의미한다. Fig. 8(b)는 AR과  $\Phi^2$ 의 변화에 따른 이방성의 변화를 살펴본 것으로서  $\Phi^2$ 가 작을 수록, 그리고 AR이 클 수록 이방성이 작아짐을 알 수 있다.  $\Phi^2$ 가 작은 경우에는 위에서 설명하였듯이 표면반응속도가 율속이 되기 때문에 마스크의 음영효과에 의한 수직방향이나 수평방향으로의 식각율의 차이가 크지 않기 때문이다. AR이 큰 경우에는 도랑 입구의 폭이 좁기 때문에 확산 저항이 우세하게 작용하여 도랑의 중심이나 도랑 벽면에서의 라디칼의 농도 차이가 크지 않아 이방성이 작으나 AR이 작은 경우에는 즉 입구의 폭이 커진 도랑의 중심이 도랑 벽면보다 라디칼이 보다 용이하게 공급되기 때문에 이방성이 커지는 것으로 생각된다. 또한 이러한 AR의 감소에 따른 이방성의 증가율은  $\Phi^2$ 가 커질 수록 더 커지는데 이는  $\Phi^2$ 가 클 수록 라디칼의 고갈이 심화되어 라디칼의 공급이 보다 원활한 도랑 중심에서의 식각이 더 빨리 진행되는 현상이 AR이 작은 경우에 더욱 뚜렷하게 나타나기 때문이다.

### 3.1.2. 이온에 의한 식각만을 고려한 경우

식각반응이 이온에 의한 식각반응으로 주로 진행될 경우는 반응기의 조업 압력이 낮아서 반응성 라디칼에 의한 화학적 식각보다 이온에 의한 이온 식각이 주요하게 작용하는 경우라 하겠다. 플라즈마 벌크에서

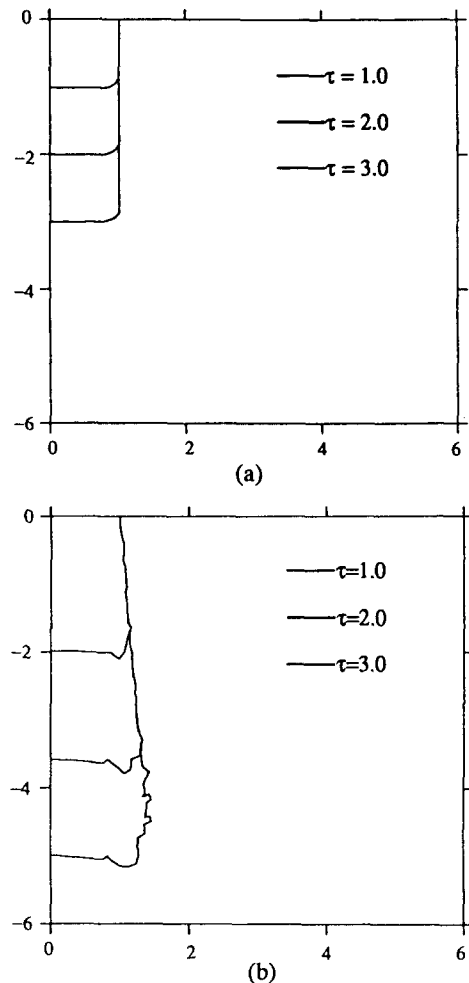


Fig. 9. Etched pattern profiles with ion-assisted etching only for (a) without mask charge effect and (b) with mask charging effect (Model I).

생성된 이온들은 쉬스 영역을 통과하면서 쉬스의 전계에 의해서 가속되어 기관을 때리게 되는데 압력이 높은 경우에는 이온들은 많은 중성입자들과 충돌하여 산란되고 또한 에너지를 잃게되나 압력이 낮은 경우에는 이러한 충돌들이 감소되고 또한 원료기체의 밀도 감소에 따른 반응성 라디칼 생성이 감소되어 전체적으로 이온에 의한 식각이 라디칼에 의한 식각에 비하여 더 우세하게 작용하게 작용한다. Fig. 9는 모델 1을 이용하여 마스크의 하전효과에 의한 이온 회절(deflection) 효과가 식각형태에 미치는 영향을 살펴본 그림이다. Fig. 9(a)는 마스크의 하전효과가 없다고 가정하고 이온에 의한 식각만을 고려한 것이고 Fig. 9(b)

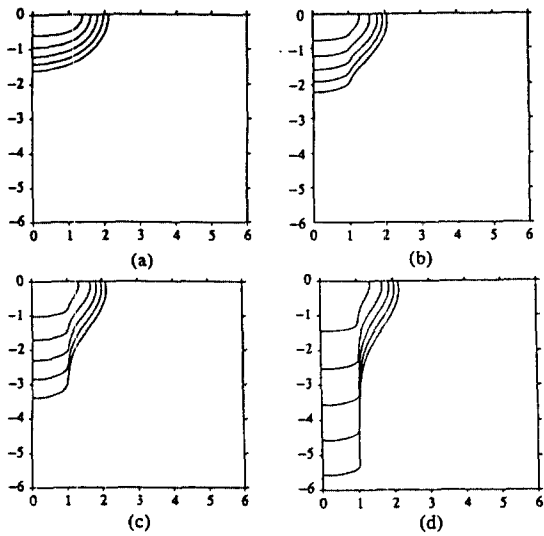


Fig. 10. Etched pattern profiles with both chemical and ion-assisted etchings for (a)  $k_i=0.0$ , (b)  $k_i=0.2$ , (c)  $k_i=0.5$  and (d)  $k_i=1.0$  ( $\Phi^2=10$ , Model I).

는 마스크의 하전효과를 고려한 경우이다. 두 경우 모두 이온의 초기 X 성분속도가 0인 경우, 즉 중성 입자와의 충돌에 의한 분산이 없다고 가정하였다. Fig. 9(a)에서는 옆벽면 식각이 전혀 없는 이방적인 식각 형태를 보여주고 있으나 마스크의 하전효과를 고려하였을 경우에는 이온의 초기 X 성분속도가 0이라고 하더라도 마스크 부근의 휘어진 전계에 의하여 이온이 도랑의 옆벽면을 식각하여 dovetailing 형태의 식각 형상이 나타남을 볼 수 있다. 옆벽면의 식각으로 인하여 입사하는 이온의 양은 일정하지만 도랑이 깊어질수록 식각해야하는 식각표면이 넓어져서 시간이 진행됨에 따라 수직방향 식각속도는 감소하는 것을 볼 수 있다. 또한 하전효과로 인한 도랑부근의 전계 형성으로 입사하는 이온이 더 큰 에너지를 얻어서 하전효과가 없는 경우보다 식각속도가 더 크게 나타나는 것 또한 볼 수 있다. 즉 식각시간  $\tau=3$ 에서의 식각된 깊이는 마스크가 하전되는 경우는 4.97로서 마스크의 하전이 없는 경우의 3보다 1.7배 정도 증가했음을 알 수 있다.

### 3.1.3. 화학적 식각과 이온에 의한 식각을 동시에 고려한 경우

대부분의 플라즈마 식각공정은 화학적 식각과 이

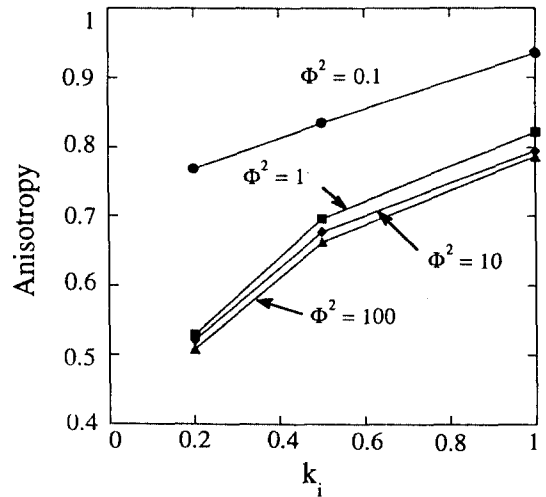


Fig. 11. Effect of ion-assisted etching rate constant on anisotropy for various Thiele moduli ( $\Phi^2$ ) at  $AR=1.0$ .

온에 의한 식각이 동시에 일어나게 된다. 이 경우 공동작용효과(synergistic effect)에 의하여 식각율은 각각의 개별적인 식각율에 비하여 크게 증가하는 것으로 보고되고 있으나 본 연구에서는 이러한 공동작용효과를 고려함이 없이 총식각율은 이온 식각율과 화학적 식각율의 합으로 가정하여 연구하였다. Fig. 10은 화학적 식각에 의한 식각율은 일정하다고 보고 이온에 의한 식각율을 증가시켜 가면서 이때의 식각 패턴을 나타낸 그림이다. 이온에 의한 식각율의 비중이 커질수록 식각깊이가 더욱 커지며 화학적 식각에 의한 영향은 마스크 밑부분에서만 약간 나타나는 데 이는 도랑이 깊어질수록 이온에 비해 반응성 라디칼의 확산이 더욱 어려워지기 때문에 거의 이온에 의한 식각이 주요하게 작용하고 있음을 알 수 있다. Fig. 11은 마스크의 입구와 높이가 일정하고 마스크에 하전효과가 없을 때의 이온에 의한 식각반응상수  $k_i$ 가 이방성에 미치는 영향을 여러  $\Phi^2$ 에 대해서 나타낸 그림이다. 전체적으로  $k_i$ 가 증가할수록 그리고  $\Phi^2$ 가 감소할수록 이방성은 향상되는 것으로 나타났다. 이는 일정한  $\Phi^2$ 에서  $k_i$ 가 커질수록 전체 식각 중에서 이온에 의한 식각이 점차로 큰 비중을 차지하게 되므로 이방성이 큰 식각패턴을 얻을 수 있으며 일정한  $k_i$ 값에서는  $\Phi^2$ 가 커질수록 화학적 식각의 비중이 커지므로 반응성 라디칼의 확산에 기인한 마스크 밑부분에서의 식각이 커져서 이방성을 저해하는 것으로

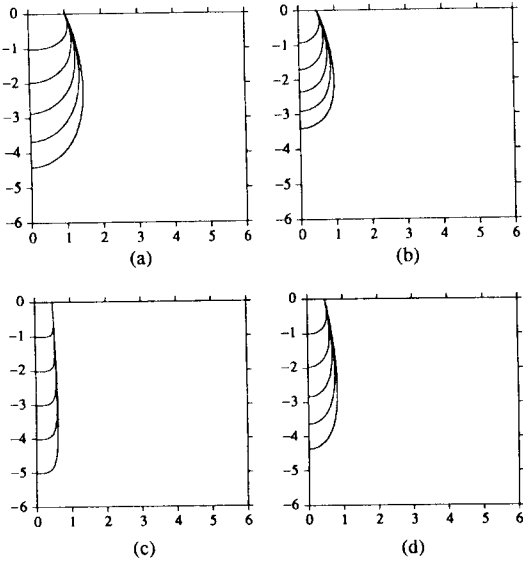


Fig. 12. Etched pattern profiles with ion-assisted etching only for (a)  $AR=0.5$ ,  $\sigma=10$ , (b)  $AR=1.0$ ,  $\sigma=10$ , (c)  $AR=1.0$ ,  $\sigma=1$  and (d)  $AR=1.0$ ,  $\sigma=5$  (Model II).

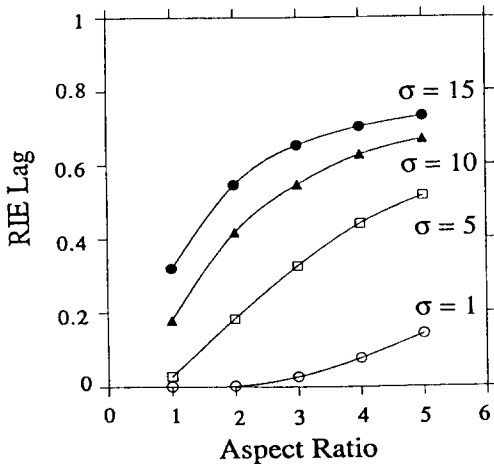


Fig. 13. Effect of aspect ratio on RIE Lag for various ion scattering parameter,  $\sigma$  at  $\tau=5$ .

해석할 수 있다.

### 3.2. 모델 II

#### 3.2.1. 이온에 의한 식각만을 고려한 경우

Fig. 12(a)와 (b)에  $\sigma$ 가 10이고 종횡비가 각각 0.5, 1일 때,  $\tau$ 가 1에서 5까지 식각형태의 시간에 따른

변화를 살펴보았다. 이 경우에는 이온의 분산이 상당히 심한 경우이므로 도랑의 입구보다 도랑의 중간부분에서의 undercut이 더 큰 bowing 형태의 식각형태가 나타나는 것을 볼 수 있다. 또한 도랑의 입구가 작은 (b)에서의 식각깊이가 같은 시간 동안의 (a)의 식각속도보다 더 작은 RIE Lag 현상이 일어나는 것을 볼 수 있다. Fig. 12의 (c)와 (d)는  $AR$ 이 1이고  $\sigma$ 가 각각 1, 5일 때의 식각형태를 나타내었다. Fig. 12(c)의 경우에서와 같이  $\sigma$ 가 아주 작을 때의 도랑 바닥의 식각형태는 평평하지만  $\sigma$ 가 증가하게 되면 도랑 벽면의 식각이 심해지는 것을 볼 수 있다.

Fig. 13에서는  $\tau=5$ 일 때  $AR$ 의 변화에 따른 RIE Lag 현상을 여러  $\sigma$ 에서 살펴보았다.  $AR$ 가 커질 수록, 그리고  $\sigma$ 가 증가할 수록 RIE Lag 현상이 심화되는 것을 볼 수 있는데 이는  $AR$ 의 증가가 이온의 가지각을 감소시키고  $\sigma$ 의 증가는 이온의 분산을 증가시키므로 도랑 바닥에 도달하는 이온의 플럭스가 감소하기 때문이다. 또한  $\sigma$ 이 큰 경우에는  $AR$ 가 증가할 수록 RIE Lag 현상이 현저하게 나타나는 반면  $\sigma$ 이 작은 경우에는 현상이 뚜렷하게 나타나지 않는데 이는  $AR$ 의 증가에 따른 가지각의 감소보다는 이온의 분산효과에 기인한 식각깊이의 감소효과가 더 크기 때문이라고 생각된다.  $\sigma$ 가 1일 때  $AR$ 가 1과 2일 때에는 RIE Lag 현상이 나타나지 않으나  $AR$ 가 더 커지게 되면 RIE Lag 현상이 두드러지게 나타나는 현상이 보이는데 이는 도랑의 입구가 넓은 때에 식각깊이가 깊어져서 이온의 가지각이 다소 좁아지더라도 분산효과가 그리 크지 않기 때문에 도랑 바닥에 도달하는 이온의 플럭스의 변화가 크지 않으나  $AR$ 이 3 이상이 되어 도랑의 입구가 좁아지게 되면 식각깊이의 증가로 인한 입사각의 감소현상이 비록 분산효과가 작다 하더라도 무시할 수 없어지기 때문이다. 이러한 결과는 아무리 조업압력을 낮추어도 RIE Lag 현상은 존재한다는 Lee 등[38]의 실험결과와 일치한다. 이와는 반대로  $\sigma=15$ 일 때에는  $AR$ 가 증가하면서 RIE Lag 현상이 급격히 증가하다가 3 이상에서는 증가율이 감소하는 현상을 볼 수 있는데 이는 이온의 분산효과가 클 때에는 도랑의 입구가 넓은 경우에 도랑의 입구가 감소함에 따른 도랑바닥에 도달하는 이온의 플럭스는 크게 감소하게 되지만 어느 정도 이상의  $AR$ 에서는 도랑바닥에서의 이온의 플럭스는 상당히 작은 최소값을 가

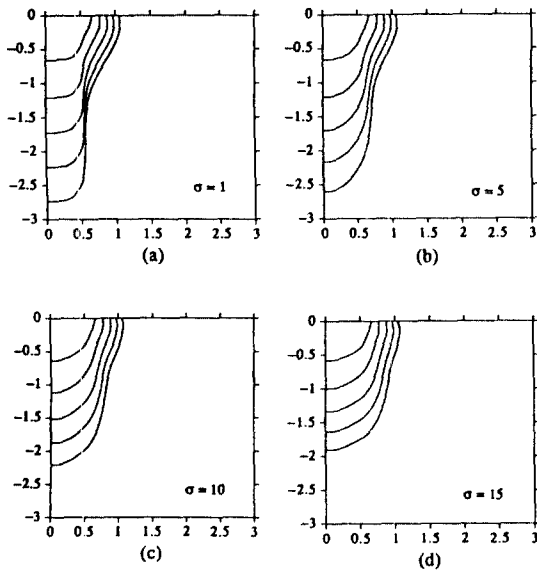


Fig. 14. Etched pattern profiles with both chemical and ion-assisted etchings for (a)  $\sigma=1$ , (b)  $\sigma=5$ , (c)  $\sigma=10$  and (d)  $\sigma=15$ .

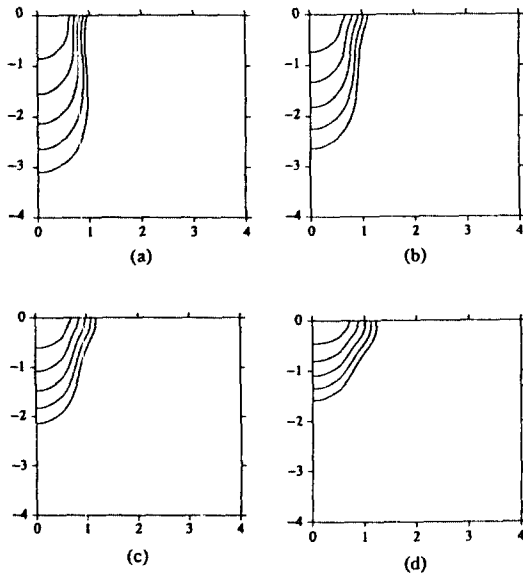


Fig. 15. Etched pattern profiles depending on ratio of Thiele modulus to ion-assisted etching rate constant for (a)  $\Phi^2=0.2$ ,  $k_i=0.8$ , (b)  $\Phi^2=0.4$ ,  $k_i=0.6$ , (c)  $\Phi^2=0.6$ ,  $k_i=0.4$  and (d)  $\Phi^2=0.8$ ,  $k_i=0.2$ .

지며 더 이상의 도랑입구의 감소에도 이 최소 플럭스는 크게 변함없이 있기 때문이라 생각된다. 또한 Fig.

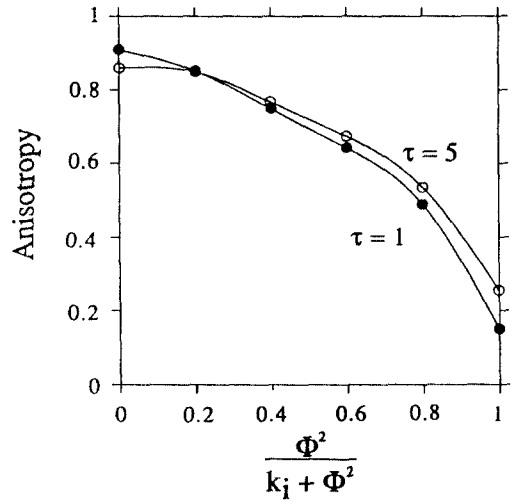


Fig. 16. Effect of ratio of Thiele modulus to ion-assisted etching rate constant on anisotropy.

13은 이온이 분산되는 정도에 따라서 즉, 조업압력에 따라서 RIE Lag 현상이 주요하게 나타나는 종횡비에 차이가 있음을 의미한다.

### 3.2.2. 화학적 식각과 이온에 의한 식각을 동시에 고려한 경우

Fig. 14는  $\Phi^2$ 과  $k_i$ 를 각각 0.5로 고정시키고 이온에 의한 식각과 화학적 식각을 동시에 고려하였을 경우의 식각형태를  $\sigma$ 를 변화시켜 가면서 조사한 결과를 보여주고 있다.  $\sigma$ 가 작은 경우에는 마스크 아래부분에서의 undercut은 존재하지만 도랑 바닥에서의 bowing 형태는 나타나지 않는데 비하여  $\sigma$ 가 증가할 수록 bowing 형태가 두드러지게 나타나고 있음을 볼 수 있다. 또한 Fig. 14(b), (c)와 같은 strawberry 형태의 식각 패턴 또한 보여준다.

Fig. 15는  $\Phi^2$ 과  $k_i$ 의 합을 1로써 고정시키고  $\sigma=10$  일 때,  $\Phi^2$ 과  $k_i$ 의 비를 변화시켜가면서 식각형태의 변화를 살펴본 그림이다. 점차로 화학적 식각의 비중이 커질 수록 식각깊이는 감소하며 bowing 형태의 식각형태 역시 줄어드는 것을 볼 수 있다. Fig. 16에 Fig. 15의 결과로부터 화학식각의 분율이 이방성에 미치는 영향을 살펴보았다. Fig. 16에서 나타난 바와 같이 화학식각의 분율이 증가할 수록 이방성은 감소하게 되는데 이는 식각 초기에 더 급격하게 감소함을 보여준다. 이는 Fig. 15에서와 같이 화학식각이 영향을

주로 미치는 곳은 마스크 아래부분이고 식각깊이가 깊어질 수록 반응성 라디칼의 고갈현상과 loading effect가 발생하게 되므로 충분한 시간이 경과한 후에는 이온에 의한 식각이 주로 일어나고 있음을 의미하고 있다. 따라서  $t=5$ 일 때 화학식각 분율에 따른 이방성의 변화가 더 작게 나타난 것으로 해석할 수 있다.

#### 4. 결 론

반응성 이온식각공정에서의 미세식각패턴 연구를 위하여 두 가지 모델을 제시하였다. 분석을 좀더 효율적으로 수행하기 위하여 문제를 단순화하여 마스크 전압분포의 시간 의존성, 도랑내부에서의 이온의 벽면이나 식각 반응생성물과의 충돌, 식각 생성물의 재증착, 표면확산 등은 고려하지 않았으며 변수들을 무차원화하였다. 모델 1에서는  $\Phi^2$ 의 변화와 마스크의 하전현상이 식각특성 즉, 식각형태, 이방성, 식각깊이 등에 미치는 영향을 조사하였다. 모델 1에서는 마스크의 하전이 dovetailing 형태를 갖는 식각패턴의 원인으로 작용하며 반응성 라디칼의 확산저항이 RIE lag 현상의 주요 원인이 됨을 고찰할 수 있었다. 모델 2에서는 이온의 분산 정도와 마스크의 중황비가 식각패턴과 RIE Lag 현상에 미치는 영향을 살펴보았다. 이때 쉬스 영역에서의 이온의 분산 정도가 식각패턴에 큰 영향을 주는 것으로 나타났다. 분산이 클 수록 옆벽면 식각이 증가하고 수직방향의 식각속도는 감소하는 것으로 나타났다. 이 밖에도 화학적 식각에 의하여 마스크가 식각되는 경우에 대한 전산모사도 실시하였으나 이는 식각형태의 변화에 큰 영향은 주지 않는 것으로 나타났다. 본 연구에서는 도랑부근을 전산모사 영역으로 설정하고 미세식각 형상에 관한 분리하여 수행하였으나 이는 벌크와 쉬스 영역에서의 전자와 이온의 에너지 밀도, 전압 분포와 밀접하게 관련이 있기 때문에 이러한 부분을 종합적으로 고려한 통합 모델이 개발되어야 하며 본 연구 결과는 이러한 종합적인 연구를 위한 첫번째 단계라 할 수 있다.

#### 감사의 글

본 연구에 연구비를 지원하여 주신 P. S. K. Tech.사 (과제번호 : I93155), 포항공대(과제번호 : P93026)와 본 연구를 위하여 VAX8800 system을 제공하여 준

포항공대 전산소에 깊은 감사를 드립니다.

#### 참고문헌

1. R. A. Gottoscho and C. W. Jurgensen, *J. Vac. Sci. Technol.* **B10**, 2133 (1992).
2. D. A. Dannier, E. J. Petrillo and M. R. Polcari, *MRS Symposium Proceedings* **68**, 15 (1986).
3. K. D. Rung, H. Momose and Y. Nakakubo, *IEEE-IEDM Tech. Dig.* 574 (1984).
4. T. Morie, K. Minigishi and S. Nakajima, *IEEE Electron Device Lett.* **ed1-4**, 11 (1983).
5. D. Chin, S. H. Dhong and G. I. Long, *J. Electrochem. Soc.* **132**, 1705 (1985).
6. R. H. Bruce and A. R. Reinberg, *J. Electrochem. Soc.* **129**, 393 (1982).
7. H. Gokan, M. Itoh and S. Esho, *J. Vac. Sci. Technol.* **B2**, 34 (1984).
8. H. B. Pogge, J. A. Bondur and P. J. Burkhardt, *J. Electrochem. Soc.* **130**, 1592 (1983).
9. K. Ukai and K. Hanazawa, *J. Vac. Sci. Technol.* **A2**, 464 (1978).
10. J. Robinson and N. Quoc-Nguyen, *IEEE Trans. Electr. Insul.* **EI-14**, 14 (1979).
11. R. D. Reeves and K. G. Balmain, *IEEE NS-28*, 4547 (1981).
12. D. J. Economou and R. C. Alkire, *J. Electrochem. Soc.* **135**, 941 (1988).
13. S. G. Ingram, *J. Appl. Phys.* **68**, 500 (1990).
14. J. C. Arnold and H. H. Sawin, *J. Appl. Phys.* **70**, 5314 (1991).
15. J. W. Coburn and H. F. Winters, *Appl. Phys. Lett.* **55**, 2730 (1989).
16. M. K. Avachev, Y. P. Baryshev, V. F. Lukichev, A. A. Orlikovsky and K. A. Valiev, *Vacuum* **42**, 129 (1991).
17. T. Arikato, K. Horioka, M. Sekine, H. Okano and Y. Horriike, *Jpn. J. Appl. Phys.* **29**, 2223 (1990).
18. J. I. Ullacia F. C. J. Petti and J. P. McVittie, *J. Electrochem. Soc.* **135**, 1521 (1988).
19. J. L. Reynolds, A. R. Neureuther and W. G. Oldham, *J. Vac. Sci. Technol.* **16**, 1772 (1979).
20. V. S. Viswanathan, *J. Vac. Sci. Technol.* **16**, 388 (1979).
21. H. W. Lehman, L. Krausbauer and R. Widmer, *J. Vac. Sci. Technol.* **14**, 281 (1977).
22. A. R. Neureuther, C. Y. Liu and C. H. Ting, *J. Vac. Sci. Technol.* **16**, 1767 (1979).



23. C. H. Ting and A. R. Neureuther, *Solid State Technology* **25**, 115 (1982).
24. M. Yoshizawa, M. Miyake, H. Horado, K. Kiuchi and S. Tazawa, *J. Electrochem. Soc.* **132**, 680 (1985).
25. M. Dalvie, K. F. Jensen and D. B. Graves, *Chem. Eng. Sci.* **136**, 1781 (1986).
26. S.-K. Park and D. J. Economou, *J. Appl. Phys.* **68**, 3904 (1990).
27. J. Kobayashi, N. Nakazato and K. Hiratsuka, *J. Electrochem. Soc.* **136**, 1781 (1989).
28. J. F. Battley, *J. Electrochem. Soc.* **124**, 147 (1977).
29. D. M. Flamm, V. M. Donnelly and J. A. Mucha, *Appl. Phys.* **52**, 3633 (1981).
30. B. D. Eldridge and L. F. Brown, *AIChE J.* **22**, 942 (1976).
31. S. C. McNevin and G. E. Becker, *J. Vac. Sci. Technol.* **B3**, 485 (1985).
32. B. R. Soller and R. F. Schman, *J. Electrochem. Soc.* **131**, 1353 (1984).
33. J. D. Chinn, W. Phillips, I. Adesida and E. D. Wolf, *Electrochem. Soc.* **131**, 375 (1984).
34. D. L. Smith and R. H. Bruce, *J. Electrochem. Soc.* **129**, 2045 (1982).
35. S. Yamamoto, T. Kure, M. Ohgo, T. Matsuzawa, S. Tachi and H. Sunami, *IEEE Trans. CAD CAD-6*, 417 (1987).
36. A. Liggett and P. L.-F. Liu, *The Boundary Integral Equation Method for Porous Media Flow* (George Allen and Unwin, London, 1983).
37. H.-J. Oh, S. Rhee and I.-S. Kang, *J. Electrochem. Soc.* **139**, 1714 (1992).
38. Y. H. Lee and Z. H. Zhou, *Proc. 8th Symp. Plasma Proc.* **90-2**, 462 (1990).